

Algorithmes variationnels quantiques pour la simulation de systèmes quantiques

par

Alexandre Choquette-Poitevin

Mémoire présenté au département de physique
en vue de l'obtention du grade de maître ès sciences (M.Sc.)

FACULTÉ des SCIENCES
UNIVERSITÉ de SHERBROOKE

Sherbrooke, Québec, Canada, 21 août 2020

Le 15 juillet 2020

le jury a accepté le mémoire de Monsieur Alexandre Choquette-Poitevin dans sa version finale.

Membres du jury

Professeur Alexandre Blais
Directeur de recherche
Département de physique

Professeur Bertrand Reulet
Membre interne
Département de physique

Professeur David Sénéchal
Président rapporteur
Département de physique

En mémoire de David Poulin

Sommaire

En attendant la venue d'un ordinateur quantique tolérant aux fautes, un défi d'intérêt pratique réside dans le développement d'algorithmes pouvant tirer profit de petits processeurs quantiques bruyants. Les algorithmes variationnels quantiques sont un exemple d'une telle méthode. Dans le cadre de ces algorithmes, un circuit de portes logiques quantiques, appelé *ansatz*, fonction d'onde d'essai ou fonction d'onde variationnelle (FOV), est exécuté dans le but de préparer l'état fondamental d'un système à résoudre. Malgré que la construction de la FOV dépende généralement du contexte, une approche populaire consiste à conserver le plus possible les symétries du problème, car cela simplifie en principe la tâche. Dans ce mémoire, je développe une nouvelle fonction d'onde allant à l'encontre de cette tendance.

Avec mes collaborateurs à l'Institut quantique ainsi que chez *IBM Research Zürich*, nous proposons QOCA, une nouvelle FOV allant au-delà des approches standards et s'inspirant de la théorie du contrôle optimal de systèmes quantiques. L'idée novatrice derrière QOCA consiste à ajouter à la fonction d'onde d'essai une composante brisant volontairement et légèrement les symétries du problème. Ce choix à première vue contre-intuitif résulte en une FOV plus robuste menant à des résultats qui sont des ordres de grandeur plus précis que ceux produits par les approches conventionnelles. J'applique QOCA à des problèmes prototypiques en matériaux quantiques ainsi qu'en chimie quantique et je montre que cette nouvelle approche peut perturber l'état de l'art. De par sa construction flexible, QOCA constitue un premier pas vers le développement d'une classe plus générale de fonctions d'ondes variationnelles brisant les symétries avec des applications en physique et en chimie.

Mots clés : Algorithmes variationnels quantiques, circuit logique quantique, *ansatz* variationnel, fonction d'onde variationnelle, contrôle optimal quantique, brisure de symétrie, modèle de Hubbard, molécule d'eau.

Remerciements

Je souhaite remercier toute personne qui a contribué de près ou de loin au succès de ma maîtrise tant au plan professionnel que personnel. Naturellement, je commence par remercier Alexandre pour son temps, sa confiance, mais surtout pour avoir pavé mon passage à Sherbrooke d’opportunités qui m’ont évolué en la personne que je suis aujourd’hui. Merci de m’avoir accueilli comme stagiaire et de m’avoir introduit à l’informatique quantique. Merci d’avoir eu l’audace d’accepter que je me lance dans un projet portant sur un sujet totalement inconnu de nous deux. Merci de m’être fait sentir à ma place dans un groupe de gens aussi talentueux. Et finalement, merci pour toutes les conférences, ateliers, écoles d’été et stage auxquels tu n’as pas hésité une seconde avant de me laisser y participer. Je n’aurais pas pu souhaiter avoir un meilleur encadrement.

Un merci spécial à Agustin qui m’a toujours soutenu inconditionnellement et avec qui j’ai passé beaucoup de temps à discuter d’algorithmes variationnels, de qubits supraconducteurs, de l’industrie quantique ainsi que de Tweets amusants. Merci à Baptiste d’avoir répondu à toutes mes questions en début de maîtrise ainsi qu’à tous les autres membres du groupe que j’ai côtoyés : Shruti, Jérôme, Udson, Arne, Jonathan, Alexandru, Joachim, Mathieu, Lucas, Catherine, Camille, Martin et Bright. Merci pour les innombrables discussions, rires et *beer meetings* aux cours des dernières années.

J’aimerais remercier l’équipe de *IBM Research Zürich* qui m’a si chaleureusement accueilli lors de mon stage de fin de maîtrise. Merci Ivano, Panos et Daniel pour l’encadrement étroit ainsi qu’à Max, Max, Patrick, Almudena, Giulia, Christa, Guglielmo, Pauline, Stefan, David, Elisa, Igor, Philippe, James pour les bons moments.

Merci à toute l’équipe présente et passée du projet Q2 avec qui j’ai appris à m’entreprendre et à me connecter au monde à l’extérieur de l’académie. Je suis très reconnaissant des rencontres et opportunités que cette initiative m’a apportées.

Merci à mes amis Jessica, Maxime, Marie-Eve, Jean-Christophe, Sara, Xavier, Dannick,

Adrien et Jean-Charles pour tous les jeux, les soupers, les spectacles, les bières, les voyages, l'escalade, le ski, le soccer, le volley-ball et autres plaisirs de la vie qui ont pimenté mes dernières années. Finalement, merci Jessica d'avoir partagé ta vie avec moi et de m'avoir si bien supporté dans mes insécurités.

Table des matières

Sommaire	ii
1 Introduction	1
2 Théorie	6
2.1 Modèle de Fermi-Hubbard	7
2.1.1 Introduction au modèle	7
2.1.2 Hamiltonien de Fermi-Hubbard	8
2.2 Algorithmes variationnels quantiques	10
2.2.1 Contexte général	10
2.2.2 Définition du problème et résumé de l’algorithme	12
2.2.3 Encodage du problème	18
2.2.4 Formes variationnelles	20
2.2.5 Mesure d’opérateurs quantiques	24
2.2.6 Optimisation classique	29
2.2.7 Implémentation numérique des VQA avec Qiskit	31
2.3 Contrôle optimal quantique	33
2.3.1 Contrôlabilité des systèmes quantiques	34
2.3.2 GRAPE : Un algorithme de contrôle optimal quantique	35
3 Un Ansatz brisant les symétries	38
3.1 Contexte	38
3.1.1 Origine et progression du projet	38
3.1.2 Motivation derrière QOCA	40
3.2 Article	44
3.3 Compléments de résultats	59
3.3.1 Modèle de Fermi-Hubbard à deux sites	59
3.3.2 Brisure de symétrie avec un état initial plus compliqué	61
3.3.3 Étude du remplissage	61

<i>Table des matières</i>	vii
3.4 Avenues de recherche	63
3.4.1 Autres termes brisant les symétries	64
3.4.2 Techniques d'optimisation avancées	66
3.4.3 QOCA pour d'autres systèmes	68
Conclusion	72
A Exemple de l'encodage de Jordan-Wigner : anneau de Fermi-Hubbard	75
B L'algorithme QAOA (<i>Quantum-Approximate-Optimization-Algorithm</i>)	78
Bibliographie	79

Table des figures

1.1	Engouement quantique au travers le temps	2
2.1	Schéma du modèle de Hubbard 2D	8
2.2	Encodage du problème dans le contexte d'un VQA	13
2.3	Schéma d'un algorithme variationnel quantique	16
2.4	Exemple de circuit d'une forme variationnelle basée sur une approche heuristique	22
2.5	Système quantique contrôlé et son contrôle optimal	36
3.1	Parcours dans l'espace de Hilbert des différents formes variationnelles	42
3.2	Convergence pour un dimer 2×1 de Fermi-Hubbard	59
3.3	Nombre de particules et infidélité au cours de l'optimisation	60
3.4	Fidélité en fonction du remplissage	62
A.1	Schéma d'un anneau de Hubbard unidimensionnel	77

Chapitre 1

Introduction

Le progrès technologique dans le domaine du calcul classique de haute performance a permis d'innombrables découvertes scientifiques et percées technologiques au fil des décennies. Cela est dû en grande partie à la miniaturisation des processeurs, ce qui se traduit par la disponibilité d'une plus grande puissance de calcul, tel que le prédit la loi de Moore. Toutefois, il existe une limite fondamentale à cette miniaturisation. En effet, les transistors, composants électroniques à la base du calcul, ne peuvent pas être rétrécis au-delà d'une certaine taille critique à laquelle des effets quantiques peuvent apparaître. Ces phénomènes peuvent compromettre les performances, car ils pourraient causer, notamment, des processus indésirables et imprévisibles dans le processeur.

En plus de cette problématique, il existe une certaine classe de problèmes d'importance pratique que les ordinateurs classiques ne peuvent pas résoudre efficacement. En effet, des problèmes tels que l'optimisation (commis voyageur et apprentissage machine), la factorisation en nombres premiers, la simulation de la matière (matériaux, molécules et protéines), et la modélisation des marchés financiers, présentent souvent une complexité exponentielle ou polynomiale avec la taille du système qui rend rapidement les calculs impraticables.

En tirant parti des propriétés intrinsèques de la mécanique quantique, un ordinateur quantique peut être en mesure de résoudre un sous-ensemble de ces problèmes avec des gains polynomiaux à exponentiels par rapport aux ordinateurs classiques. Bien qu'il soit encore trop tôt pour prédire quels domaines seront le plus touchés par les futures générations de processeurs quantiques, la simulation de la matière quantique présente un intérêt particulier pour les chercheurs dans le domaine [1]. Il est important de noter que ce dernier a le potentiel de révolutionner des domaines tels que la médecine (conception de médicaments),

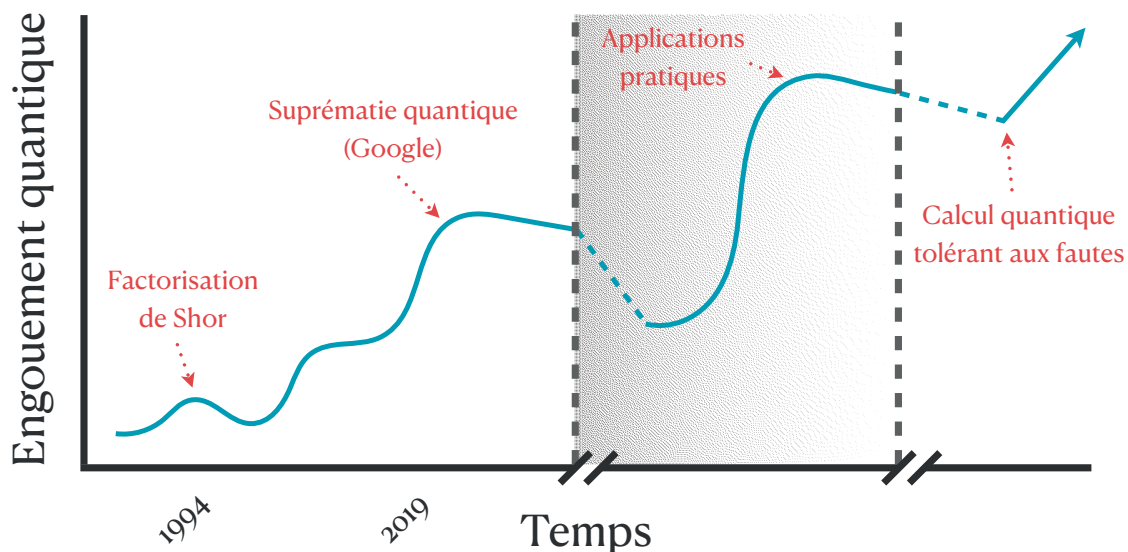


FIGURE 1.1 Évolution temporelle estimée de l'engouement quantique, soit le degré d'excitation face aux ordinateurs quantiques. Figure inspirée d'une présentation de Jarod McClean au March Meeting 2019.

l'ingénierie (conception de matériaux), l'agriculture (engrais) et la chimie (conception de processus chimiques).

Bien que les dispositifs quantiques actuels soient de taille modeste et sujets au bruit provenant de l'environnement, nous nous attendons à ce que les générations futures de processeurs quantiques, de taille et de qualité supérieures, pourront un jour surpasser l'état de l'art du calcul classique. Une façon imparfaite mais utile de représenter la progression du domaine est d'estimer l'évolution temporelle de l'engouement quantique, soit le degré d'excitation général face aux ordinateurs quantiques (figure 1.1). Cette figure illustre comment le domaine s'est d'abord emballé en 1994 alors que Peter Shor nous démontrait qu'un ordinateur quantique pourrait éventuellement factoriser de grands nombres efficacement [2], ce qui aurait d'énormes conséquences en cryptographie. Un autre jalon majeur du domaine a récemment été atteint en 2019 par l'équipe de Google [3] en démontrant ce que John Preskill appelle la *suprémie quantique*, i.e. le moment où un ordinateur quantique accomplit un calcul plus rapidement que n'importe quel superordinateur classique. Malgré qu'il s'agisse d'une avancée scientifique et technologique remarquable, l'expérience de Google n'a que peu d'intérêt pratique.

Le prochain jalon majeur aura probablement lieu au moment où les ordinateurs quantiques auront des applications pratiques. Ceci signifie que, pour certaines tâches, il y aura un avantage considérable à opter pour un ordinateur quantique. C'est également à ce moment

que la technologie prendra une réelle valeur commerciale allant au-delà d'un gain anticipé. Ceci étant dit, il est difficile de prévoir quand cela se produira, d'où la première discontinuité en temps sur la figure 1.1. Présentement, groupes universitaires, multinationales technologiques et startups naissantes compétitionnent dans une course à l'ordinateur quantique pour réaliser la première application pratique.

La finalité de l'ordinateur quantique est une technologie tolérante aux fautes dans laquelle nous avons appris à contourner de façon fiable et reproductible l'effet néfaste du bruit environnemental dans les qubits (élément de base du calcul quantique). Dans ce paradigme, nous aurons une confiance absolue en la technologie, tout comme nous l'avons aujourd'hui envers nos téléphones intelligents. Il est davantage difficile de prédire le moment où nous en serons là.

L'ère NISQ Mais qu'en est-il aujourd'hui ? Nous entrons présentement dans un nouveau paradigme de l'informatique quantique où de petits processeurs bruyants sont de plus en plus accessibles. Nous parlons de dispositifs de diverses architectures ayant de quelques dizaines à quelques centaines de qubits qui sont gouvernées par le bruit. En effet, ces ordinateurs demeurent trop petits pour y accueillir quelconque code de correction d'erreurs, car ces derniers requièrent généralement un grand nombre de qubits physiques pour encoder un seul qubit logique. L'acronyme NISQ a également été proposé par John Preskill [4] et signifie *Noisy Intermediate-Scale Quantum*, ce qui décrit bien la situation actuelle.

L'arrivée de ces nouveaux dispositifs quantiques de plus en plus puissants exige un changement radical dans l'approche algorithmique et dans la manière dont nous abordons les différents problèmes. Effectivement, plusieurs algorithmes connus, comme celui de Shor, requerront fort probablement une technologie tolérante aux fautes. Il est donc important de développer des approches capables d'exploiter la puissance de calcul des petits processeurs quantiques bruyants.

Pour cette raison, une nouvelle classe d'algorithmes hybrides quantiques-classiques a récemment été introduite [5,6]. Connus sous le nom d'algorithmes variationnels quantiques (VQA¹), ces algorithmes utilisent un ordinateur quantique que pour la partie la plus complexe d'un calcul, tandis qu'un coprocesseur classique plus robuste sert d'optimiseur qui fonctionne en boucle avec le dispositif quantique. Ici, le mot "variationnel" fait référence au fait qu'il y a des paramètres libres dans l'algorithme qui sont ajustés de manière itérative pour trouver la solution, et que cette solution est la plus petite valeur que l'algorithme peut trouver. Le résultat est donc appelé l'état fondamental du problème. De par sa nature

1. De l'anglais, *Variational Quantum Algorithms*

variationnelle, cette approche a démontré avoir une certaine résilience au bruit. D'ailleurs, plusieurs croient fortement que ce sera avec ces algorithmes variationnels qu'on verra surgir les premières applications pratiques des ordinateurs quantiques.

Ces algorithmes variationnels sont au coeur de ce mémoire. Le résultat qui y est présenté sous la forme d'un article scientifique au chapitre 3 traite d'une invention reliée à une sous-partie de l'algorithme, notamment le circuit de portes logiques qui sera exécuté sur un ordinateur quantique. Tout au long du mémoire, je ferai référence à ce circuit comme étant la *forme variationnelle*, la fonction d'onde d'essai, la fonction d'onde variationnelle (FOV) ou l'*Ansatz*² d'un VQA. Pour ce projet, le but spécifique est de développer cette forme variationnelle de façon à ce qu'il soit possible de préparer de façon robuste et efficace l'état fondamental de modèles fermioniques. Il s'agit d'un problème important puisque ces modèles décrivent souvent des concepts au coeur de la nature, comme par exemple les matériaux quantiques et les molécules.

Deux approches générales existent dans la conception des formes variationnelles appliquées à des problèmes de nature quantique. Premièrement, il y a les formes variationnelles qui tirent avantage de l'architecture spécifique de l'ordinateur quantique sur lequel ils seront implémentés en ne faisant appel qu'aux portes logiques facilement exécutables sur ce dernier. Ceux-ci ont l'avantage de produire de courts circuits quantiques, ce qui est pertinent étant donné le haut niveau de décohérence présent dans les processeurs quantiques actuels. Par contre, ils ont peu de chances de devenir une solution à plus long terme pour les VQA puisqu'ils échouent à converger lorsque la taille du problème grandit. Puis, il y a les formes variationnelles qui sont conçus en s'inspirant de la physique (ou de la chimie) du problème. Ces derniers ont davantage le potentiel d'être performants sur des problèmes de plus grande taille, mais requièrent habituellement des circuits quantiques significativement plus profonds, ce qui rend leur implémentation difficile sur les processeurs quantiques actuels.

Pour les formes variationnelles inspirées de la physique du problème, l'approche standard consiste à limiter au maximum la taille de l'espace de Hilbert qui sera explorée par la FOV. Ceci est généralement accompli en exploitant les différentes symétries du problème, car elles permettent de mieux encadrer la recherche variationnelle. En pratique, deux stratégies permettent d'y arriver. Premièrement, on peut modifier le Hamiltonien du problème à résoudre de sorte à ce qu'il ne tienne compte que d'un secteur de symétries particulier, mais ceci complexifie généralement l'étape de mesure de l'état variationnel quantique. Autrement, il est possible de concevoir la fonction d'onde d'essai de sorte qu'elle ne permette pas à l'état variationnel de s'échapper du secteur de symétries souhaité. Dans ce cas, il ne suffit que

2. De l'Allemand, *approche*.

d’initialiser l’algorithme dans le bon sous-espace.

Dans ce projet de recherche, nous allons à l’encontre de ces approches populaires. En particulier, nous avons conçu une classe de formes variationnelles inspirées de la physique qui, volontairement, brisent certaines symétries du problème en introduisant des unitaires qui ne commutent pas avec le Hamiltonien du problème à résoudre. Ces idées sont fortement inspirées du domaine du contrôle optimal quantique dans lequel on cherche à accomplir des opérations sur des systèmes quantiques de manière rapide et précise. Pour cette raison, nous avons donné le nom de *Quantum-optimal-control-inspired Ansätze*, ou QOCA, à cette classe de formes variationnelles. Cette nouvelle approche aux algorithmes variationnels quantiques nous permet de concevoir des formes variationnelles plus robustes, précises et fiables que ce qu’on trouve présentement dans la littérature.

Ce mémoire est organisé de la façon suivante. Au chapitre 2, je passerai en revue le cadre théorique nécessaire à la compréhension des résultats de l’article de la section 3.2. Plus précisément, j’introduirai d’abord le modèle de Fermi-Hubbard, qui est central à ce projet, à la section 2.1. Puis, j’introduirai formellement les algorithmes variationnels quantiques dans la section 2.2, pour ensuite élaborer sur quelques aspects pertinents du contrôle optimal quantique à la section 2.3. C’est au chapitre 3 que je présenterai les détails de mon approche unique aux algorithmes variationnels quantiques. Les résultats issus de cette approche figurent dans une publication scientifique qui sera présentée à la section 3.2 et complétée à la section 3.3. Finalement, j’aborderai brièvement différentes avenues de recherche potentielles qui découlent naturellement de mes résultats à la section 3.4.

Chapitre 2

Théorie

Ce chapitre a pour but d’initier le lecteur aux concepts théoriques menant à la compréhension de l’article de la section 3.2. Je commencerai à la section 2.1 par introduire le modèle de Fermi-Hubbard qui sert de banc d’essai aux méthodes développées dans ce mémoire. Je motiverai notamment pourquoi il s’agit d’un bon candidat pour cette tâche. Je poursuivrai à la section 2.2 en présentant les algorithmes variationnels quantiques (VQA), ce qui constitue le sujet central de mon projet. Pour ce faire, j’expliquerai les principes fondamentaux et motivations derrière les méthodes existantes ainsi que les avantages quantiques qu’ils procurent. J’aborderai également en détail chaque composante de la routine des VQA en dirigeant le lecteur vers plus de références que nécessaire afin d’approfondir ses connaissances.

Le domaine d’applicabilité des VQA va au-delà des problèmes à nature quantique et inclut notamment l’optimisation combinatoire classique et la résolution de systèmes d’équations linéaires. Ceci étant dit, je me concentre sur les problèmes quantiques et, plus précisément, les problèmes fermioniques. Il est toutefois utile de garder en tête que nombres des concepts abordés dans la section 2.2 sont susceptibles d’être généralisés à d’autres types de problèmes.

Pour conclure cette section, je survolerai quelques concepts de la théorie du contrôle optimal quantique à la section 2.3. En effet, la méthode développée dans ce mémoire, QOCA, consiste en un circuit quantique en partie inspiré de cette théorie. J’introduirai donc les concepts clés permettant de comprendre le rôle du contrôle optimal quantique dans QOCA.

2.1 Modèle de Fermi-Hubbard

2.1.1 Introduction au modèle

Mon projet consiste à comparer les performances de différentes constructions de circuits quantiques (formes variationnelles) permettant de trouver les états propres d’une matrice hermitienne. En guise de banc d’essai à cette comparaison, je considère tout d’abord le modèle Fermi-Hubbard (FHM) [7–10]. Ce dernier est un modèle emblématique de la physique de la matière condensée offrant des moyens d’étudier les systèmes où les interactions entre les électrons sont fortes (systèmes fortement corrélés). Il a été introduit en 1964 par Hubbard, Kanamori et Gutzwiller qui ont proposé des simplifications drastiques au Hamiltonien fermionique général en espérant obtenir un “modèle exagérément simplifié” facilement soluble. Nous voici aujourd’hui, près de 60 ans plus tard, en train de proposer d’utiliser des ordinateurs quantiques pour le résoudre.

Le Hamiltonien du modèle de Hubbard est composé de deux parties : \hat{T} , qui décrit des sauts quantiques cohérents de fermions et \hat{V} , qui décrit une interaction coulombienne non-linéaire et de courte portée entre ces fermions. Individuellement, \hat{T} et \hat{V} sont exactement solubles et ne privilégient par d’ordre particulier. Cependant, leur somme $\hat{H}_{\text{FHM}} = \hat{T} + \hat{V}$ peut donner naissance à des phénomènes non-triviaux intéressants comme une transition métal-isolant, l’antiferromagnétisme, le ferromagnétisme, le liquide de Tomonaga–Luttinger et même la supraconductivité [11]. Cette réalisation a motivé l’étude de ce modèle pour comprendre des systèmes allant des fermions lourds [12] aux supraconducteurs à haute température critique [13, 14]. Une représentation schématisée du modèle de Fermi-Hubbard en deux dimensions est présentée à la figure 2.1 où on y voit l’effet de \hat{T} et \hat{V} .

En conséquence de la physique riche qu’il refferme, le modèle de Hubbard a été largement étudié au moyen de méthodes numériques classiques telles que la diagonalisation exacte et le Monte-Carlo quantique. Plusieurs de ces techniques puissantes requièrent une solution exacte de l’équation de Schrödinger d’un petit amas de sites fermioniques [15–19]. Ceci est toutefois une tâche exponentiellement difficile pour un calculateur classique. Aujourd’hui, les plus grands amas pouvant être traités par diagonalisation exacte sur des processeurs classiques sont de l’ordre de 24 sites [20]. Un problème de taille similaire, si exécuté sur un ordinateur quantique, nécessiterait en principe que 50 qubits, ce qui ne semble pas impossible dans un avenir rapproché.

Pour cette raison, le modèle de Hubbard est étudié depuis longtemps comme une application de la simulation quantique, notamment avec l’estimation de phase quantique [21,

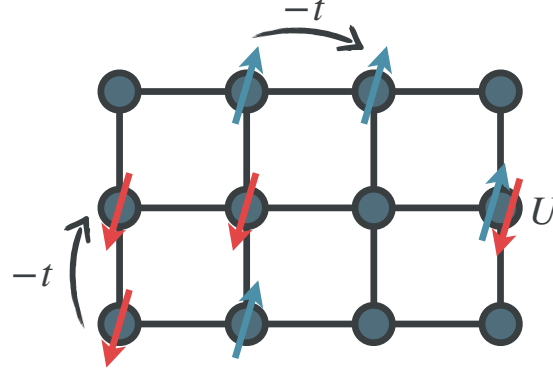


FIGURE 2.1 Représentation schématisée du modèle de Fermi-Hubbard (2.7) en deux dimensions. On y voit l’effet des termes de sauts (\hat{T}) d’amplitude $-t$ qui agissent sur les fermions de même spin ainsi que l’interaction coulombienne (\hat{V}) de force U qu’il subissent lorsqu’un site est doublement occupé.

22] et les algorithmes de recuit quantique [23, 24]. Ces méthodes sont potentiellement précises et extensibles à de plus gros systèmes, mais il est peu probable qu’elles soient exécutées sur des dispositifs NISQ, car elles sont sujettes à des erreurs dépassant les capacités des processeurs actuels (en l’absence de correction d’erreurs quantique). Puisque ce modèle est notoirement difficile à résoudre à l’aide d’ordinateurs classiques, il est un bon candidat pour une expérience de preuve de principe ou pour une analyse comparative des ordinateurs quantiques, comme il a été souligné dans la référence [25]. Ainsi, la résolution du FHM représente un bon test de performance des méthodes variationnelles faisant l’objet de ce mémoire.

2.1.2 Hamiltonien de Fermi-Hubbard

Le modèle de Fermi-Hubbard est décrit par des opérateurs d’échelle fermioniques en seconde quantification. Les opérateurs de création \hat{a}_p^\dagger et d’annihilation \hat{a}_p permettent respectivement d’augmenter ou de diminuer l’occupation de l’orbitale fermionique p . Ils sont définis par les relations d’anti-commutation suivante :

$$\{\hat{a}_p, \hat{a}_q^\dagger\} = \delta_{pq}, \quad (2.1)$$

$$\{\hat{a}_p, \hat{a}_q\} = 0, \quad (2.2)$$

$$\{\hat{a}_p^\dagger, \hat{a}_q^\dagger\} = 0. \quad (2.3)$$

On note souvent les vecteurs de base comme un produit tensoriel des états encodant l'occupation $f_p \in \{0, 1\}$ de chaque orbitale fermionique p ,

$$|f_0, \dots, f_p, \dots, f_{N-1}\rangle \equiv |f_0\rangle \otimes \dots \otimes |f_p\rangle \otimes \dots \otimes |f_{N-1}\rangle. \quad (2.4)$$

Ainsi, l'action des opérateurs d'échelle sur les vecteurs de base s'écrit

$$\begin{aligned} \hat{a}_p |f_0, \dots, 1_p, \dots, f_{N-1}\rangle &= (-1)^{\sum_{l < p} f_l} |f_0, \dots, 0_p, \dots, f_{N-1}\rangle, \\ \hat{a}_p^\dagger |f_0, \dots, 0_p, \dots, f_{N-1}\rangle &= (-1)^{\sum_{l < p} f_l} |f_0, \dots, 1_p, \dots, f_{N-1}\rangle, \end{aligned} \quad (2.5)$$

avec $\hat{a}|0\rangle = \hat{a}^\dagger|1\rangle = 0$, comme on peut le déduire des relations d'anti-commutation. La phase $(-1)^{\sum_{l < p} f_l}$ "compte" l'occupation des orbitales $< p$ et assure l'antisymétrisation de l'état.

Spin et sites fermioniques Lorsqu'on considère le degré de liberté du spin- $\frac{1}{2}$, il est alors utile de parler de *site* fermionique. Dû au principe d'exclusion de Pauli, un site peut au maximum contenir deux fermions de spins opposés. Pour le site i , il y a donc quatre états possibles correspondant à

$$\begin{aligned} |\uparrow\rangle &\equiv |0\rangle_{i\uparrow} \otimes |0\rangle_{i\downarrow}, \\ |\downarrow\rangle &\equiv |0\rangle_{i\uparrow} \otimes |1\rangle_{i\downarrow}, \\ |\uparrow\rangle &\equiv |1\rangle_{i\uparrow} \otimes |0\rangle_{i\downarrow}, \\ |\uparrow\downarrow\rangle &\equiv |1\rangle_{i\uparrow} \otimes |1\rangle_{i\downarrow}. \end{aligned} \quad (2.6)$$

Pour un système de L sites fermioniques, je choisis d'arranger les $N = 2L$ orbitales comme $|f_{1\uparrow} \dots f_{L\uparrow}; f_{1\downarrow} \dots f_{L\downarrow}\rangle$, mais ce choix est purement conventionnel.

De façon plus formelle, le Hamiltonien du modèle de Hubbard pour L sites de réseau fermioniques est donné par

$$\hat{H}_{\text{FHM}} = \underbrace{-t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (\hat{a}_{i\sigma}^\dagger \hat{a}_{j\sigma} + \hat{a}_{j\sigma}^\dagger \hat{a}_{i\sigma})}_{\equiv \hat{T}} + \underbrace{U \sum_{i=1}^L \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} - \mu \sum_{i,\sigma} \hat{n}_{i\sigma}}_{\equiv \hat{V}}, \quad (2.7)$$

où i, j sont les indices de site du réseau et $\sigma = \{\uparrow, \downarrow\}$ est l'indice de spin. $\langle i, j \rangle$ désigne une somme sur les paires de sites immédiatement voisins et $\hat{n}_{i\sigma} = \hat{a}_{i\sigma}^\dagger \hat{a}_{i\sigma}$ est l'opérateur d'occupation de l'orbitale fermionique $i\sigma$. Le premier terme décrit les sauts aux premiers voisins d'amplitude $-t$ et sera souvent désigné par \hat{T} . Lorsque des conditions limites périodiques sont employées, ce terme est diagonal dans l'espace des impulsions et son état

fondamental consiste en des ondes planes délocalisées. Dans certains cas, l'état fondamental de \hat{T} peut être dégénéré. Ceci fait l'objet d'une discussion dans l'article de la section 3.2. Le deuxième terme est l'interaction de Coulomb d'amplitude U et le dernier terme est le potentiel chimique. J'utiliserai souvent \hat{V} pour désigner les deux derniers termes puisqu'ils sont diagonaux dans la base des positions (ou orbitales de Wannier). L'état fondamental de \hat{V} est une fonction d'onde localisée qui peut également avoir une dégénérescence. La valeur de μ dans le Hamiltonien (2.7) détermine, entre autres, le remplissage de l'état fondamental. Selon le remplissage et la valeur de U , les réels états propres seront soit localisés ou délocalisés. La solution localisée correspond à l'isolant de Mott, où les électrons sont figés en place par la forte interaction coulombienne.

Un régime particulièrement intéressant du modèle de Hubbard est le demi-remplissage (lorsque $\mu = U/2$), à couplage intermédiaire, $U/t \sim 4$. Dans ce régime, il est impossible de traiter précisément soit \hat{T} ou \hat{V} de manière perturbative, car les deux contribuent significativement à l'énergie du système. Il y a donc une grande compétition entre les phases localisées et délocalisées des électrons, ce qui engendre une physique intéressante. Comme je cherche à comparer les performances des différentes approches variationnelles pour tous les cas du modèle de Hubbard, je travaillerai dans ce régime particulièrement difficile. Les conclusions tirées seront donc davantage généralisables à des régimes plus simples du FHM.

2.2 Algorithmes variationnels quantiques

2.2.1 Contexte général

Le recours aux algorithmes variationnels n'est pas propre à l'informatique quantique. En fait, il s'agit d'une approche largement répandue en physique [26–31] et en chimie [32–34]. Cette méthode est couramment utilisée pour résoudre des problèmes statiques comme trouver l'état fondamental ainsi que son énergie, et dynamiques comme simuler l'évolution temporelle en temps réel et imaginaire. Le principe derrière ces méthodes est le suivant. Étant donné que la complexité associée à la simulation de systèmes quantiques à N -corps croît exponentiellement avec la taille du problème, il devient rapidement impossible d'effectuer des calculs classiques exacts. Les méthodes variationnelles contournent cette *malédiction de la dimensionnalité* en ne sondant seulement qu'une petite partie de l'espace de Hilbert qui est physiquement motivée [31, 35, 36]. En effet, selon le contexte, il se peut que la fonction d'onde du système puisse être bien approximée par un petit nombre de paramètres qui permettent de produire des états quantiques dans ce sous-espace de Hilbert restreint. Par exemple, dans

le cas des *Matrix Product States* (MPS), ceci est vrai seulement lorsque le Hamiltonien est gappé et que les interactions sont locales [37].

L'état paramétré produit par cette méthode est appelé état variationnel. De façon générale, ces états sont encodés dans les paramètres variationnels *via* une forme variationnelle ou fonction d'onde variationnelle (FOV). Ce dernier représente l'approche employée pour décrire le problème physique et fournit typiquement une estimation éduquée à sa solution. De manière abstraite, l'encodage de la solution s'effectue ainsi

$$\text{Paramètres variationnels } \boldsymbol{\theta} \longrightarrow \boxed{\text{Ansatz}} \longrightarrow \text{Fonction d'onde } |\psi(\boldsymbol{\theta})\rangle, \quad (2.8)$$

où $\boldsymbol{\theta}$ est un vecteur regroupant les paramètres variationnels. La FOV agit donc en temps que cadre qui définit l'espace des solutions possibles au problème et il est primordial de le concevoir judicieusement. Dans les méthodes variationnelles, les paramètres sont optimisés itérativement afin de converger vers la solution.

Malgré le succès des méthodes variationnelles classiques, il existe une classe de fonctions d'onde hautement intriquées qui ne peuvent pas être approximées efficacement par la méthode précédemment décrite. Il s'avère que ces fonctions d'onde intriquées sont souvent la solution de problèmes importants en simulation de matériaux quantiques et de molécules. Cela a récemment motivé le développement d'algorithmes quantiques pouvant tirer profit de l'espace exponentiellement grand des qubits pour la simulation de systèmes quantiques [38–40]. Dès la fin des années 1990, les premiers algorithmes dédiés à la simulation fermionique ont vu le jour [41–43]. Un algorithme particulièrement utile à la simulation quantique est l'estimation de phase quantique [22] qui permet de déterminer les états et valeurs propres d'un Hamiltonien. Suite à sa publication, plusieurs algorithmes de simulation fermionique l'ont intégré afin de démontrer un gain exponentiel pour le calcul de spectres moléculaires [44, 45]. Depuis ces contributions initiales, le coût quantique de ces méthodes continue de décroître [46–49].

Malheureusement, ces algorithmes devront attendre avant de pouvoir être exécutés sur un ordinateur quantique. Effectivement, afin de produire des résultats pratiques, ces méthodes requièrent beaucoup de qubits, un grand nombre de portes logiques ainsi que de la correction d'erreur quantique, ce qui nécessitera encore des années, voir des décennies, de progrès. Cette réalisation nous force à repenser notre approche envers le calcul quantique à court et moyen termes. Pour le moment et les années à venir, nous devons nous poser les questions suivantes :

1. Quels sont les problèmes que nous pouvons résoudre avec des ordinateurs quantiques de taille modérée sans correction d'erreur ? et

2. Quelles méthodes sont les mieux adaptées à ces ordinateurs pour y parvenir ?

Ces questions ont mené au paradigme des *algorithmes variationnels quantiques* (VQA), des méthodes hybrides figurant des co-processeurs classiques et quantiques fonctionnant en boucle de rétroaction. Ces algorithmes ont plusieurs avantages. Par exemple, de par leur construction à base de portes logiques, ils peuvent être exécutés sur n'importe quel ordinateur quantique [5,50,51] et peuvent même tirer avantage des forces d'une architecture donnée [50]. De plus, contrairement aux méthodes décrites précédemment, comme l'estimation de phase, seulement un court circuit de portes logiques est exécuté sur l'ordinateur quantique, ce qui relaxe la contrainte de correction d'erreurs. En fait, ces algorithmes ont démontré une certaine résilience intrinsèque au bruit, puisque certains types d'erreurs y sont atténuées variationnellement [6]. Expérimentalement, ceci est souvent complémenté de techniques de mitigation des erreurs qui permettent de sélectionner seulement des états qui respectent certaines conditions [52,53] ou d'extrapoler les calculs dans la limite où il n'y aurait pas de bruit [54–56]. Ils sont donc particulièrement bien équipés pour explorer les performances des processeurs NISQ, et peuvent même servir en tant qu'évaluation comparative entre les différentes architectures [25]. Pour toutes ces raisons, les VQA sont de bons candidats pour être les premiers à générer des applications pratiques aux ordinateurs quantiques à court-terme sans (ou avec très peu de) correction d'erreurs quantique.

À cause de leur attrait de gain à court-terme ainsi que leur grande flexibilité, les VQA font surface dans une vaste gamme de domaines, notamment la finance [57], les mathématiques [58], l'apprentissage machine [59,60], l'optimisation combinatoire [61], la chimie et matériaux quantiques [62–66], ainsi que l'optique quantique [67]. D'ailleurs, plusieurs compagnies offrant des solutions logicielles pour ordinateurs quantiques comme *Zapata Computing*, *1Qbit*, *QC Ware* et *QxBranch* basent une partie de leur modèle d'affaire sur des VQA, ce qui témoigne du potentiel de l'approche.

2.2.2 Définition du problème et résumé de l'algorithme

Dans cette section, je définis le problème qui est traité par la formulation originale des VQA. Je décrirai donc une méthode permettant de résoudre un problème statique, soit la solution de basse énergie à l'équation de Schrödinger indépendante du temps. Plus généralement, cette approche permet de déterminer la plus petite valeur propre d'une matrice hermitienne \hat{H} ainsi que le vecteur propre associé. La solution à ce problème représente un enjeu important en physique et en chimie, car l'état de plus basse énergie joue un rôle important dans les propriétés thermodynamiques des systèmes à température finie. De plus, dans le contexte de l'optimisation combinatoire classique, cet état encode la

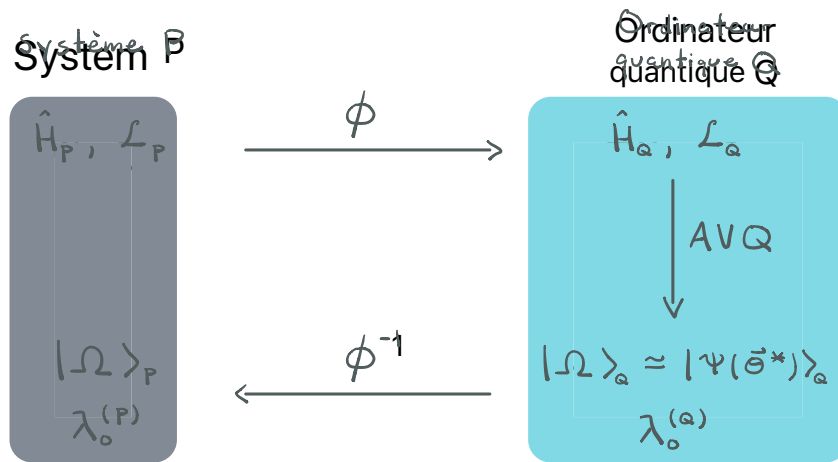


FIGURE 2.2 Schéma de l’encodage du problème \hat{H}_P du système P dans le Hamiltonien \hat{H}_Q du système Q , soit l’ordinateur quantique. Les algèbres de Lie respectives de ces deux systèmes sont \mathcal{L}_P et \mathcal{L}_Q et l’isomorphisme ϕ permet de passer d’une à l’autre. Un VQA permet de déterminer une approximation $|\psi(\theta^*)\rangle_Q \simeq |\Omega_0\rangle_Q$ à l’état fondamental $|\Omega_0\rangle_Q$ de \hat{H}_Q ainsi que sa valeur propre associée $\lambda_0^{(Q)}$. θ^* représente les paramètres optimaux issus du VQA. L’isomorphisme inverse ϕ^{-1} permet de retrouver la solution telle que décrite par l’algèbre \mathcal{L}_P du système P .

solution optimale du problème. Il est néanmoins possible de modifier la méthode de base pour accéder à d’autres quantités pertinentes.

Récemment, des variantes de cette approche ont été proposées afin de déterminer certains états excités du Hamiltonien du système [68–73], qui sont utiles dans le calcul des propriétés spectrales des molécules et des fonctions de Green¹ des matériaux quantiques. Également, il existe des méthodes basées sur les VQA permettant de simuler l’évolution temporelle en temps réel [74–76] et imaginaire [77, 78] sous le Hamiltonien \hat{H} . Un bon résumé de ces méthodes se trouve dans les références [65, 79]. Dans tous les cas, l’approche utilisée se base sur la minimisation de la valeur moyenne d’un opérateur quantique encodant une certaine fonction objectif. Je décris maintenant cette procédure.

Résoudre un problème sur un ordinateur quantique

Afin de résoudre un problème donné sur un ordinateur quantique, il faut premièrement l’encoder dans un langage qui pourra être compris par ce dernier. Cette procédure est schématisée à la figure 2.2. Considérons un système P , dans lequel se trouve le problème

1. En utilisant la représentation de Lehmann.

à résoudre \hat{H}_P , et un système Q , qui est un ordinateur quantique de N qubits. *A priori*, nous ne supposons rien sur ces deux systèmes outre le fait qu'il est possible d'encoder P dans les N qubits de Q . Associés à P et Q sont leurs algèbres de Lie respectives \mathcal{L}_P et \mathcal{L}_Q . Par exemple, P pourrait être un système fermionique décrit par les opérateurs d'échelle de fermions \hat{a}^\dagger et \hat{a} . Naturellement, Q est un ordinateur quantique et son algèbre de Lie est donnée par les matrices de Pauli $\{\hat{I}, \hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z\}$. Pour pouvoir encoder P dans Q , il doit exister un isomorphisme ϕ entre \mathcal{L}_P et \mathcal{L}_Q , *i.e.* un encodage à deux sens qui permet de passer d'une algèbre à l'autre. Un encodage connu sous le nom de *transformation de Jordan-Wigner* pour des problèmes fermioniques est présenté à la section 2.2.3.

Grâce à ϕ , on peut encoder le problème \hat{H}_P de P dans le Hamiltonien \hat{H}_Q de Q . Puisque une solution dans Q sera également solution dans P , on peut se concentrer uniquement sur la tâche de résoudre \hat{H}_Q . Par simplicité visuelle, je laisserai donc tomber l'indice Q dans ce qui suit. Nous sommes donc intéressés par les valeurs propres λ_i et vecteurs propres $|\Omega_i\rangle$ du Hamiltonien \hat{H} encodant le problème dans Q .

Afin de trouver une solution approximative à l'état fondamental $|\Omega_0\rangle$ ainsi que sa valeur propre λ_0 , les VQA se basent sur la méthode variationnelle de Rayleigh-Ritz qui est conçue pour résoudre des problèmes statiques.

Principe variationnel de Rayleigh-Ritz

Cette méthode permet de trouver une solution approximative à l'équation de Schrödinger indépendante du temps. Premièrement, on ordonne les valeurs propres de \hat{H} en ordre croissant de sorte que $\lambda_0 \leq \lambda_1 \leq \dots \leq \lambda_{2N-1}$. On rappelle que la valeur moyenne d'un opérateur quantique \hat{O} dans l'état arbitraire $|\Phi\rangle$ se calcule de la manière suivante

$$\langle \hat{O} \rangle_{|\Phi\rangle} = \frac{\langle \Phi | \hat{O} | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \Phi \rangle}. \quad (2.9)$$

Pour la suite, je supposerai parfois que l'état $|\Phi\rangle$ est normalisé, *i.e.* $\langle \Phi | \Phi \rangle = 1$. Par contre, une attention particulière doit être accordée à la normalisation, car cette hypothèse ne tient plus lorsque l'état est victime d'erreurs incohérentes ou que des opérations non-unitaires lui sont appliquées. Pour faire apparaître le principe variationnel, il est utile d'exprimer la valeur moyenne de \hat{H} dans l'état $|\Phi\rangle$ lorsque celui-ci est décomposé sur les vecteurs propres

$|\Omega_i\rangle$ de \hat{H} de sorte que $|\Phi\rangle = \sum_i c_i |\Omega_i\rangle$ où $\{c_i\} \in \mathbb{C}$. Cette valeur moyenne devient

$$\langle \hat{H} \rangle_{|\Phi\rangle} \equiv \frac{\langle \Phi | \hat{H} | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \Phi \rangle} \quad (2.10)$$

$$= \frac{\sum_{ij} c_i^* c_j \langle \Omega_i | \hat{H} | \Omega_j \rangle}{\sum_{ij} c_i^* c_j \langle \Omega_i | \Omega_j \rangle} \quad (2.11)$$

$$= \frac{\sum_i |c_i|^2 \lambda_i}{\sum_i |c_i|^2}, \quad (2.12)$$

où j'ai utilisé $\hat{H}|\Omega_i\rangle = \lambda_i|\Omega_i\rangle$ et $\langle \Omega_i | \Omega_j \rangle = \delta_{ij}$. Étant donné que $|c_i|^2 \geq 0$, le principe variationnel de la mécanique quantique stipule que

$$\frac{\langle \Phi | \hat{H} | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \Phi \rangle} \geq \lambda_0, \quad (2.13)$$

ou l'égalité tient lorsque $|\Phi\rangle$ est l'état qui minimise la valeur moyenne de \hat{H} , ou encore

$$\lambda_0 = \min_{|\Phi\rangle} \frac{\langle \Phi | \hat{H} | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \Phi \rangle}. \quad (2.14)$$

Dans cette équation, la minimisation s'effectue sur $|\Phi\rangle$ qui est défini dans un espace de Hilbert exponentiellement grand, ce qui est difficile à accomplir en pratique. Comme mentionné précédemment à l'équation (2.8), dans le contexte général des algorithmes variationnels, on contourne ce problème en approximant la fonction d'onde $|\Phi\rangle$ *via* une FOV paramétrée par une petite collection de paramètres réels qu'on regroupe dans le vecteur θ . L'état résultant s'écrit $|\psi(\theta)\rangle$. Dans ce cas, la minimisation s'effectue uniquement sur les éléments de θ , qui contient généralement un nombre largement plus petit de paramètres libres ($\ll 2^N$) que le nombre de composantes de l'état quantique $|\Phi\rangle$ (2×2^N). L'approximation à λ_0 ainsi obtenue, λ_0^{est} , est bornée de la façon suivante

$$\lambda_0 \leq \lambda_0^{\text{est}} = \min_{\theta} \frac{\langle \psi(\theta) | \hat{H} | \psi(\theta) \rangle}{\langle \psi(\theta) | \psi(\theta) \rangle}. \quad (2.15)$$

Ceci a comme implication de garantir que l'algorithme ne peut pas trouver un état qui a une valeur moyenne de \hat{H} plus faible que λ_0 . En conséquence, le choix optimal des paramètres variationnels, noté θ^* , qui produira la meilleure approximation à l'état fondamental est celui qui minimisera la valeur moyenne de \hat{H} . Comment cela est réalisé sur un ordinateur quantique est l'objet de la prochaine section.

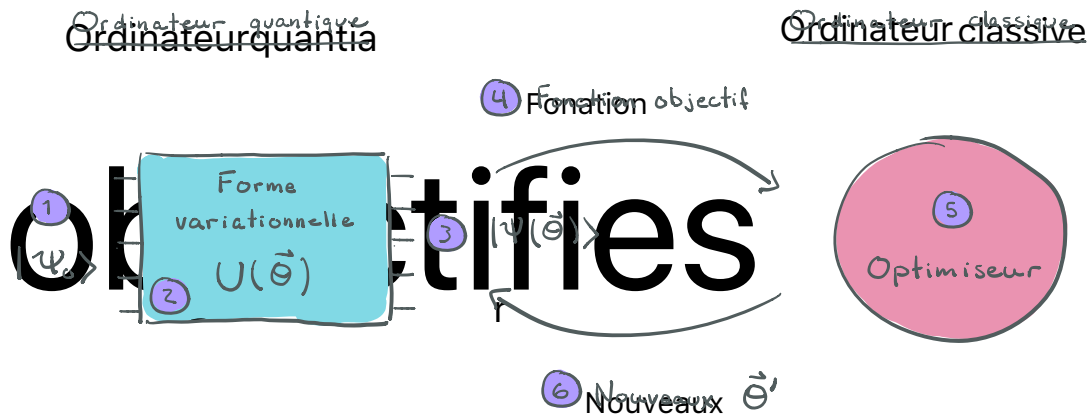


FIGURE 2.3 Schéma d'un algorithme variationnel quantique. Un ordinateur quantique est utilisé pour préparer un état quantique variationnel $|\psi(\theta)\rangle = U(\theta)|\psi_0\rangle$ à partir d'un état initial connu $|\psi_0\rangle$. Les paramètres variationnels classiques θ décrivant $|\psi(\theta)\rangle$ sont ajustés itérativement jusqu'à ce que la valeur d'une fonction objectif atteigne un minimum.

Aperçu d'un algorithme variationnel quantique

Malgré que l'optimisation s'effectue sur un petit nombre de paramètres, il est tout de même nécessaire de pouvoir stocker l'état $|\psi(\theta)\rangle$ en mémoire. Malheureusement, pour les ordinateurs classiques, ceci requiert une quantité de ressources qui croît exponentiellement avec la taille du problème. Utiliser un ordinateur quantique réduit la complexité de cette tâche à une croissance linéaire avec la taille du problème. Dans le cadre des VQA, on utilise donc un processeur quantique uniquement pour préparer, stocker et mesurer l'état quantique $|\psi(\theta)\rangle$ alors que la minimisation sur θ s'effectue entièrement sur un coprocesseur classique, plus robuste et rapide en pratique pour ce type de tâche.

Ceci s'opère en une boucle d'optimisation hybride entre les coprocesseurs quantiques et classiques. Cette boucle est présentée schématiquement à la figure 2.3. Dans cette routine d'optimisation, on utilise un ordinateur quantique pour préparer un état quantique $|\psi(\theta)\rangle$ (3), qui est paramétré par $\{\theta\} \in \mathbb{R}$, un ensemble de paramètres variationnels classiques. Cet état est généralement produit à partir d'un état initial connu et facile à préparer, $|\psi_0\rangle$ (1), auquel est appliqué un circuit quantique paramétré $U(\theta)$ (2), aussi appelé *forme variationnelle* ou fonction d'onde variationnelle (FOV), pour trouver $|\psi(\theta)\rangle = U(\theta)|\psi_0\rangle$. Ce circuit est paramétré à l'aide d'un petit nombre de paramètres variationnels, qui correspondent typiquement aux angles de rotation des portes logiques.

Afin de quantifier la qualité de la préparation de l'état avec une paramétrisation θ

donnée, la valeur d'une fonction objectif (4) est mesurée en utilisant l'état variationnel préparé. Les détails de cette fonction objectif dépendent de la nature du problème. Par exemple, pour les problèmes de chimie et de physique, un choix commun est l'énergie de l'état donnée par la valeur moyenne du Hamiltonien du problème

$$E[\boldsymbol{\theta}] = \frac{\langle \psi(\boldsymbol{\theta}) | \hat{H} | \psi(\boldsymbol{\theta}) \rangle}{\langle \psi(\boldsymbol{\theta}) | \psi(\boldsymbol{\theta}) \rangle}. \quad (2.16)$$

En utilisant le résultat de l'évaluation de la fonction objectif, une routine d'optimisation classique (5) est utilisée pour produire un nouvel ensemble de paramètres variationnels, $\boldsymbol{\theta}'$ (6). Ces derniers ont pour but de produire une meilleure approximation de l'état qui minimise la valeur moyenne de \hat{H} . La routine est considérée terminée lorsque l'évaluation de la fonction objectif a convergé vers une valeur faible ou suite à un nombre maximum d'itérations fixé préalablement. La valeur optimale des paramètres trouvée par l'algorithme est dénotée $\boldsymbol{\theta}^*$ et donc l'état variationnel approximant le mieux le véritable état fondamental de \hat{H} est

$$|\psi(\boldsymbol{\theta}^*)\rangle \simeq |\Omega_0\rangle, \quad (2.17)$$

et son *énergie* est ainsi bornée comme à l'équation (2.15) par

$$E[\boldsymbol{\theta}^*] = \frac{\langle \psi(\boldsymbol{\theta}^*) | \hat{H} | \psi(\boldsymbol{\theta}^*) \rangle}{\langle \psi(\boldsymbol{\theta}^*) | \psi(\boldsymbol{\theta}^*) \rangle} \gtrsim \lambda_0. \quad (2.18)$$

La flexibilité de cette procédure vient notamment du fait que le Hamiltonien du problème \hat{H} peut encoder une grande variété de problèmes tant en optimisation combinatoire classique qu'en simulation quantique. De plus, une grande liberté s'offre à nous lors de la conception de la forme variationnelle permettant une adaptation aux restrictions expérimentales des processeurs quantiques. Étant donné que les VQA ont une construction modulaire, des améliorations et diverses variations sont possibles pour chacune de ses sous-parties. D'ailleurs, chaque composante des VQA représente un domaine de recherche actif épaulé par une communauté scientifique et industrielle grandissant à un rythme impressionnant.

En résumé Les grandes étapes des algorithmes variationnels quantiques sont :

1. **La préparation d'un état quantique variationnel** $|\psi(\boldsymbol{\theta})\rangle = U(\boldsymbol{\theta})|\psi_0\rangle$ à partir d'un état initial connu $|\psi_0\rangle$ auquel on applique la forme variationnelle (fonction d'onde variationnelle) $U(\boldsymbol{\theta})$ (section 2.2.4) ;
2. **La mesure quantique de la fonction objectif** représentée par la valeur moyenne de \hat{H} à l'aide d'une technique appelée *moyennage du Hamiltonien* (section 2.2.5) ;

3. **La minimisation des paramètres variationnels θ** à l'aide d'une routine d'optimisation classique non-linéaire (section 2.2.6) ;
4. **La répétition des étapes 1 à 3** jusqu'à ce que le critère de convergence soit atteint et que $|\psi(\theta^*)\rangle \simeq |\Omega_0\rangle$.

Dans les sections qui suivent, j'élabore davantage sur les détails techniques concernant chacune de ces étapes. Mais avant, j'explique brièvement une méthode permettant d'encoder des problèmes fermioniques sur un ordinateur quantique.

2.2.3 Encodage du problème

Il existe plusieurs méthodes afin d'encoder des modes bosoniques ainsi que fermioniques dans des qubits. Pour les bosons, l'enjeu est de représenter une infinité d'états de Fock dans l'espace de Hilbert fini des qubits. Dans le cas des fermions, le défi principal repose dans l'antisymétrisation qui peut être encodée directement dans la fonction d'onde (première quantification) ou dans les opérateurs qui agissent sur cette dernière (seconde quantification). Dans ce mémoire, je me concentre sur les encodages fermioniques en seconde quantification et plus précisément sur la transformation de Jordan-Wigner [80], soit l'encodage fermionique le plus répandu et le plus intuitif. Pour plus de détails sur d'autres encodages fermioniques, je dirige le lecteur vers l'article revue de McArdle *et al.* [79].

Encodage fermionique de Jordan-Wigner

Le but général de l'encodage est d'établir une correspondance (isomorphisme) entre les opérateurs qui agissent sur des fermions indiscernables et ceux agissant sur des qubits discernables. Une approche est de représenter l'espace de Fock des fermions (occupations) dans un état de qubits. C'est ce qu'accomplit la transformation de Jordan-Wigner (JW) [80].

Dans l'approche de JW, l'occupation d'une orbitale fermionique est directement encodée dans les états $|0\rangle$ (vide) et $|1\rangle$ (occupée) d'un qubit. De façon plus formelle, N orbitales fermioniques sont encodées dans N qubits comme

$$|f_0, f_1, \dots, f_{N-1}\rangle \xrightarrow{JW} |q_0, q_1, \dots, q_{N-1}\rangle, \quad (2.19)$$

où $f_p = q_p \in \{0, 1\}$ sont respectivement l'occupation de l'orbitale fermionique p et l'état du qubit p . Un site fermionique tel qu'introduit à l'équation (2.6) est encodé à l'aide de deux qubits comme $(0, \downarrow, \uparrow, \uparrow\downarrow) \mapsto (00, 01, 10, 11)$.

Dans la transformation de JW, les opérateurs d'échelle fermioniques \hat{a}_p et \hat{a}_p^\dagger introduits dans la section 2.1.2 s'écrivent

$$\begin{aligned}\hat{a}_p &\mapsto \hat{\sigma}_p \bigotimes_{l < p} \hat{Z}_l, \\ \hat{a}_p^\dagger &\mapsto \hat{\sigma}_p^\dagger \bigotimes_{l < p} \hat{Z}_l,\end{aligned}\tag{2.20}$$

où $\hat{\sigma} = |0\rangle\langle 1|$ et \hat{Z} est la matrice de Pauli $\hat{\sigma}_z$. Le produit tensoriel de \hat{Z} tient compte de la parité de l'état et est souvent appelée la *chaîne de Jordan-Wigner*². Elle encode la phase $(-1)^{\sum_{l < p} f_l}$ de l'équation (2.5).

Voyons comment se transforment les différents termes du Hamiltonien de Fermi-Hubbard (2.7). Les termes de saut entre les orbitales fermioniques p et q avec $p < q$ se transforment comme

$$\hat{a}_p^\dagger \hat{a}_q + \hat{a}_q^\dagger \hat{a}_p \mapsto \frac{1}{2}(\hat{X}_p \hat{X}_q + \hat{Y}_p \hat{Y}_q) \bigotimes_{l=p+1}^{q-1} \hat{Z}_l,\tag{2.21}$$

où le produit d'opérateurs \hat{Z} disparaît lorsque $q = p + 1$. L'opérateur nombre sur l'orbitale p et donc l'interaction de Coulomb entre les orbitales p et q deviennent,

$$\begin{aligned}\hat{n}_p = \hat{a}_p^\dagger \hat{a}_p &\mapsto \frac{1}{2}(\hat{I} - \hat{Z}_p), \\ \hat{n}_p \hat{n}_q &\mapsto \frac{1}{4}(\hat{I} - \hat{Z}_p - \hat{Z}_q + \hat{Z}_p \hat{Z}_q).\end{aligned}\tag{2.22}$$

Plus de détails sur la transformation de termes fermioniques figurant dans les Hamiltoniens de chimie quantique se trouvent dans la référence [81].

En utilisant l'encodage de Jordan-Wigner, les Hamiltoniens fermioniques s'écrivent comme une somme de produits tensoriels d'opérateurs de Pauli comme

$$\hat{H} = \sum_j h_j \hat{P}_j = \sum_j h_j \bigotimes_{i=0}^{N-1} \hat{\sigma}_i^j,\tag{2.23}$$

où $h_j \in \mathbb{R}$ est un coefficient réel et $\hat{\sigma}_i^j \in \{\hat{I}, \hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z\}$ est une matrice de Pauli qui opère sur le qubit i . $\hat{P}_j = \bigotimes_{i=0}^{N-1} \hat{\sigma}_i^j$ est appelé *chaîne de Pauli* et le nombre d'opérateurs de Pauli dans \hat{P}_j qui diffèrent de l'identité et appelé le *poids de Pauli*. Cette décomposition est à la base de la méthode permettant de mesurer la valeur moyenne de \hat{H} sur un ordinateur quantique. Cette dernière sera présentée à la section 2.2.5. Le fait qu'on puisse écrire le Hamiltonien

2. *Jordan-Wigner string* en anglais.

comme à l'équation (2.23) demeure vrai peu importe le choix de l'encodage.

En guise d'exemple, je présente comment appliquer la transformation de Jordan-Wigner au modèle de Fermi-Hubbard unidimensionnel avec conditions limites périodiques à l'annexe A.

2.2.4 Formes variationnelles

La flexibilité derrière les VQA vient de la liberté dont on dispose pour la conception de la forme variationnelle $U(\theta)$, qui sert à approximer les états propres du Hamiltonien à résoudre. Le succès de l'algorithme dépend donc énormément de la qualité et de la construction de cette FOV. En général, la forme variationnelle est un circuit quantique composé d'une séquence de portes prédéfinies qu'on applique à un état initial connu, comme illustré à la figure 2.3. Certains angles de rotations de ces portes deviennent alors les paramètres variationnels et leur valeur est ajustée itérativement par la routine d'optimisation classique.

La conception de la forme variationnelle dépend grandement de la nature du problème à résoudre et de la structure de sa solution. Par exemple, pour des problèmes d'optimisation combinatoire classique, la solution recherchée correspond à un état de base qui minimise la valeur moyenne du Hamiltonien qui encode le problème. L'état final n'a donc aucun enchevêtrement, car le Hamiltonien du problème est diagonal dans la base de calcul (Hamiltonien classique). Trouver cet état de base demeure tout de même un problème d'intérêt puisqu'un nombre exponentiel de solutions existe. Une approche pour préparer un tel état de base qui génère présentement beaucoup d'attention est basée sur l'algorithme QAOA (*Quantum-Approximate-Optimization-Algorithm*) [61, 82–85] qui implémente une version Trotterisée de l'évolution adiabatique quantique [86]. Cette approche est présentée à l'annexe B.

Pour les problèmes à nature quantique, la solution recherchée correspond généralement à un état hautement intriqué. C'est d'ailleurs cette propriété de la solution qui la rend difficilement calculable classiquement. Deux approches extrêmes existent pour la conception d'une FOV dédiée aux problèmes quantiques. Tout d'abord, il y a celle dite *heuristique* qui vise à produire des circuits peu profonds et une utilisation réduite de portes à deux qubits coûteuses en s'appuyant sur des opérations quantiques (portes) qui sont propres à l'architecture du processeur [50, 87]. Ensuite, il y a les fonctions d'ondes d'essai qui sont *inspirés de la physique* du problème [68, 88–93]. Ces derniers sont parfois calqués sur des méthodes numériques classiques pouvant systématiquement approximer les états propres du problème. Ils basent souvent leur construction sur les différents processus quantiques décrits par le modèle à résoudre.

Qualités d’une bonne forme variationnelle Dans tous les cas, il est pertinent d’établir une *liste de souhaits* pour la construction d’une forme variationnelle idéale. Malgré qu’il soit difficile pour une FOV de répondre à tous ces critères simultanément, cette liste expose davantage les différents aspects sur lesquels il est possible de faire des compromis. La fonction d’onde doit idéalement

1. être structuré autour du problème pour contourner l’enjeu des “plateaux de faible gradient” [94] (voir prochaine section) et restreindre la recherche variationnelle à un petit espace vectoriel ;
2. produire des circuits peu profonds pouvant être implémentés sur un processeur NISQ ;
3. maintenir sa performance lorsque la taille du problème croît.

Dans la présente section, je fournis quelques détails sur différentes approches à la construction de formes variationnelles dédiées à la résolution de problèmes quantiques.

Approche heuristique à la construction de la forme variationnelle

Une approche heuristique à la construction de la fonction d’onde d’essai est connu sous le nom de *Hardware-efficient Ansatz* (HEA) et a été introduit lors une démonstration expérimentale d’un VQA par Kandala *et al.* [50]. Cette FOV exploite des circuits quantiques de faible profondeur qui sont spécifiquement adaptés au processeur quantique utilisé afin d’éviter une compilation coûteuse en portes. En effet, sa construction tire profit de la connectivité des qubits physiques du processeurs. À cause de cela, l’approche heuristique est mieux adaptée pour être implémentée sur des ordinateurs quantiques à court terme puisque ces derniers ont des temps de cohérence et une topologie limitée.

Le HEA est construit en appliquant des blocs successifs de rotations paramétrées à un qubit, suivis d’une unitaire créant de l’enchevêtrement $\hat{U}_{\text{Ent.}}$ qui est composée de portes à deux qubits qui sont natives au dispositif. Cette forme variationnelle est illustrée à la figure 2.4. Un exemple d’unitaire de préparation d’état pour N qubits est

$$\hat{U}_{\text{HEA}}(\boldsymbol{\theta}) = \prod_d \hat{U}_{\text{Ent.}} \prod_{n=1}^N R_Z^{(n)}(\theta_{n,d}^Z) R_Y^{(n)}(\theta_{n,d}^Y), \quad (2.24)$$

où $\boldsymbol{\theta} = \{\theta_{n,d}^Z, \theta_{n,d}^Y\}$ regroupe tous les paramètres variationnels. $R_{\sigma_a}^{(n)}(\theta) = \exp[-i\theta\sigma_a/2]$ indique une rotation à un qubit d’un angle θ autour de l’axe $a \in \{x, y, z\}$ appliqué au

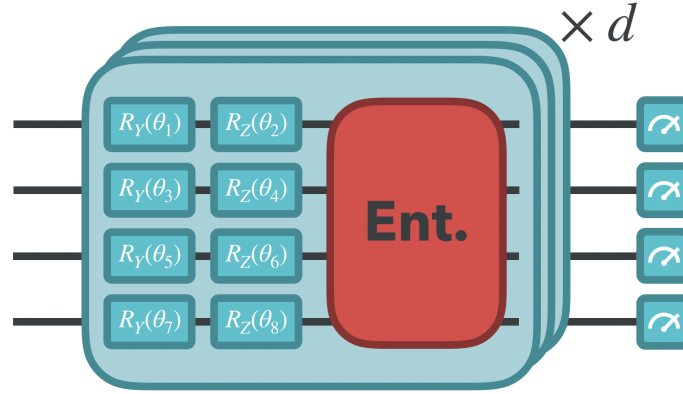


FIGURE 2.4 Circuit quantique typique pour le *Hardware-efficient Ansatz* [50]. Il est construit par une application successive de blocs de rotations à un qubit paramétrées, suivis d’une unitaire créant de l’enchevêtrement $\hat{U}_{\text{Ent.}}$ qui est composé de portes à deux qubits qui sont natives au dispositif.

qubit n . σ_a est la matrice de Pauli correspondante. Le paramètre d est l’indice de couches, ou *profondeur*, de la forme variationnelle.

L’un des principaux avantages du HEA est qu’il est bien adapté à l’exploration exhaustive de l’espace de Hilbert, car il ne tient pas compte des différentes symétries du problème. Sim *et al.* [95] ont d’ailleurs proposé des métriques servant à comparer l’expressibilité³ ainsi que le pouvoir enchevêtrant de différentes constructions de circuits heuristiques. Cependant, pouvoir couvrir une large portion de l’espace de Hilbert n’est pas nécessairement synonyme de construction performante.

En effet, le manque de structure par rapport au système à simuler fait en sorte que cette approche heuristique n’est pas susceptible d’être utile pour de plus gros systèmes. Nous avons des raisons de croire que les approches heuristiques telles que décrites ici échouent pour les problèmes qui nécessitent une paramétrisation plus extensive de la FOV qui croît avec la taille du système. Effectivement, la croissance rapide de la dimension de l’espace des paramètres, et le fait que les circuits ne sont pas structurés par rapport au problème ont pour conséquence de faire souffrir le HEA de l’enjeu des “plateaux à faible gradient”⁴ [94]. Ces derniers décrivent de grandes régions de l’espace des paramètres où le gradient de la fonction objectif devient nul, rendant l’optimisation classique exponentiellement difficile. Barkoutsos *et al.* [87] a proposé de contourner cet obstacle en développant des formes variationnelles heuristiques plus structurées qui conservent le nombre de particules et cette

3. La capacité d’un circuit à générer des états (purs) qui sont bien représentatifs de l’espace Hilbert.

4. *Barren plateaus* en anglais.

approche a été démontrée expérimentalement sur un processeur supraconducteur [96]. Par contre, afin d’approcher la précision des approches inspirés de la physique, le nombre de couches de la FOV doit grandir rapidement jusqu’au point où le nombre de paramètres variationnels approche, ou même surpasse, la dimension de l’espace de Hilbert.

Le HEA a également été mis en œuvre expérimentalement pour préparer l’état fondamental de petites molécules [50, 69, 96] et pour simuler le repliement de protéines [66]. Cependant, résoudre de petits exemples de problèmes importants ne prouve pas la performance de la méthode pour des systèmes de plus grande taille. Les enjeux soulevés dans cette section peuvent être évités en utilisant des formes variationnelles qui imitent la physique du problème, comme le *Variational Hamiltonian Ansatz*.

Constructions inspirées de la structure du problème

Pour construire des FOV inspirées de la physique (PIA⁵), on utilise une connaissance préalable de la structure du problème lors de la conception de la forme variationnelle. En 2015, Wecker *et al.* a introduit le *Variational Hamiltonian Ansatz* (VHA), qui consiste en une version paramétrée du circuit quantique implémentant l’évolution temporelle (Trotterisation) sous le Hamiltonien du problème [90]. Le VHA est inspiré par la préparation d’état adiabatique et peut être vu comme étant une adaptation de l’algorithme QAOA [61, 82–85] (équation (B.4)) pour des problèmes de chimie et de physique. Le but du VHA est d’implémenter une trotterisation d’un parcours adiabatique vers l’état fondamental en utilisant un nombre de Trotter insuffisant pour produire des résultats précis. Cependant, on peut optimiser variationnellement les différents temps de l’évolution afin de regagner cette précision.

L’unitaire de préparation d’état se construit ainsi. Considérons un Hamiltonien à résoudre \hat{H} pouvant se décomposer en une somme de termes locaux $\hat{H} = \sum_i h_i P_i$, où P_i est une chaîne de Pauli et h_i un coefficient scalaire réel. De plus, les termes de \hat{H} peuvent être groupés arbitrairement dans des sous-ensembles \hat{H}_j de sorte que $\hat{H} = \sum_j \hat{H}_j$. La façon dont ce regroupement est effectué peut dépendre du problème, mais en général on tente de générer le plus petit nombre de groupes comprenant seulement des termes qui commutent.

À étape d de la forme variationnelle, chaque groupe \hat{H}_j est associé au paramètre variationnel θ_{dj} et donc la fonction d’onde totale de VHA s’écrit

$$\hat{U}_{\text{VHA}}(\boldsymbol{\theta}) = \prod_d \prod_j e^{i\theta_{dj} \hat{H}_j}, \quad (2.25)$$

5. *Physics-Inspired-Ansatz* ou *Problem-Inspired-Ansatz*.

où $\theta = \{\theta_{dj}\}$. Le paramètre d est l'indice de couches, ou *profondeur*, de la forme variationnelle. Il est à noter que $e^{i\theta_{dj}\hat{H}_j}$ doit être décomposé davantage en un produit d'exponentielles de chaînes de Pauli puisque \hat{H}_j peut contenir plusieurs termes. Dans le cas où tous les éléments de \hat{H}_j commutent, cette décomposition s'effectue exactement. Malgré que l'équation (2.25) imite une Trotterisation du premier ordre, d'autres version du VHA peuvent être obtenues en considérant des formules de Trotter-Suzuki d'ordres supérieurs [97–99]. Grâce au regroupement des termes de \hat{H} , cette approche peut être implémentée en utilisant peu de paramètres variationnels, ce qui facilite l'optimisation classique. Cependant, la profondeur du circuit, qui dépend de la complexité du problème à résoudre, peut être très grande.

Pour cette raison, le VHA semble davantage adapté aux problèmes sur réseau, comme le modèle de Hubbard, qu'au Hamiltoniens moléculaires généraux. En effet, l'efficacité de la méthode pour M modes est déterminée par le nombre de termes dans \hat{H} qui peut croître comme $\mathcal{O}(M^4)$ pour les molécules alors que le modèle de Hubbard contient que $\mathcal{O}(M)$ termes.

Parce qu'elle est construite autour du problème Hamiltonien, la méthode VHA implémente des opérations qui conservent les symétries du problème. Par exemple, si aucun terme du Hamiltonien ne permet de modifier le nombre de particules, cette quantité sera conservée dans l'état variationnel. Cela restreint la recherche variationnelle à un petit sous-espace de l'espace de Hilbert qui, dans le cas où il comprend l'état fondamental, peut augmenter la performance de l'algorithme. À cause de cela, les méthodes structurées autour du Hamiltonien du problème sont plus susceptibles d'être utilisées pour résoudre des problèmes de plus grande taille que les méthodes heuristiques.

2.2.5 Mesure d'opérateurs quantiques

Une fois l'état variationnel $|\psi(\theta)\rangle$ préparé sur l'ordinateur quantique, la prochaine étape du VQA consiste à estimer la fonction objectif donnée par la valeur moyenne du Hamiltonien du problème $\langle \hat{H} \rangle_{|\psi(\theta)\rangle} \equiv \langle \psi(\theta) | \hat{H} | \psi(\theta) \rangle$, où je suppose que l'état est normalisé. Il est important de pouvoir mesurer cette quantité avec une bonne précision. En effet, le calcul de taux de réaction en chimie est exponentiellement sensible aux variations d'énergie et il est donc important de déterminer ces énergies avec une précision de $\epsilon \sim 10^{-3}$ Hartree, soit la précision chimique⁶ [65]. Pour ce qui est du modèle de Hubbard, une mesure de l'énergie du fondamental doit être plus précise que la différence entre le fondamental et le premier état excité (gap), soit $\epsilon \ll 10^{-2}t$ à $10^{-3}t$, dépendant de la taille et topologie du système ainsi que du ratio U/t .

6. Chemical accuracy en anglais

Tel que discuté plus haut, une approche à la détermination des valeurs propres d’une matrice hermitienne est l’estimation de phase quantique [22, 44, 100–102]. Cet algorithme permet d’évaluer l’énergie d’un état propre de \hat{H} avec une précision ϵ moyennant une seule préparation d’état et un coût en portes de $\mathcal{O}(\frac{1}{\epsilon})$. Cependant, afin de garantir son succès, toutes les opérations de l’estimation de phase de quantique doivent être effectuées sans erreur, ce qui requiert la correction d’erreur quantique. Ceci n’est évidemment pas réalisable pour les processeurs de l’ère NISQ qui présentent des temps de cohérence fortement limitant et l’incapacité de performer de la correction d’erreur. Afin de contourner ce problème, Peruzzo *et al.* [5] a proposé une méthode appelée *moyennage du Hamiltonien*⁷ qui permet de réduire les exigences en temps de cohérence du calcul de $\langle \hat{H} \rangle$.

Moyennage du Hamiltonien

Cette méthode permet d’estimer la valeur moyenne d’une matrice hermitienne sur des processeurs quantiques susceptibles aux erreurs en tirant profit de plusieurs préparations d’états répétées afin de relâcher la contrainte de cohérence. Cette approche échange donc temps de cohérence pour un plus grand nombre d’appels à l’ordinateur quantique.

L’idée de base derrière cette méthode est qu’il est toujours possible d’exprimer une matrice hermitienne comme une somme de termes de Pauli \hat{P}_j . Comme mentionné à la section 2.2.3, on peut écrire un Hamiltonien comme

$$\hat{H} = \sum_j h_j \hat{P}_j = \sum_j h_j \bigotimes_{i=0}^{N-1} \hat{\sigma}_i^j, \quad (2.26)$$

où $h_j \in \mathbb{R}$ et $\hat{\sigma}_i^j \in \{\hat{I}, \hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z\}$ est une matrice de Pauli agissant sur le qubit i . Par linéarité, la valeur moyenne du Hamiltonien dans l’état $|\psi\rangle$ est donnée par

$$\langle \hat{H} \rangle = \sum_j h_j \langle \hat{P}_j \rangle \quad (2.27)$$

$$= \sum_j h_j \langle \psi | \hat{P}_j | \psi \rangle \quad (2.28)$$

$$= \sum_j h_j \langle \psi | \bigotimes_{i=0}^{N-1} \hat{\sigma}_i^j | \psi \rangle. \quad (2.29)$$

Ainsi, afin d’estimer $\langle \hat{H} \rangle$, il suffit de mesurer la valeur moyenne de chaque terme de Pauli et ensuite calculer la somme pondérée des résultats classiquement. Cependant, cette procédure

7. *Hamiltonian averaging* en anglais.

requiert un très grand nombre de mesures, et donc de préparations d'état. Premièrement, chaque terme de Pauli \hat{P}_j doit être échantillonné plusieurs fois afin d'obtenir un résultat statistiquement significatif et, deuxièmement, les Hamiltoniens fermioniques contiennent formellement $\mathcal{O}(N_{\text{orb.}}^4)$ termes qui demandent à être évalués, $N_{\text{orb.}}$ étant le nombre d'orbitales fermioniques. Heureusement, comme il sera discuté plus bas, il existe des stratégies permettant de réduire le coût associé à la mesure.

Mesure d'un terme de Pauli

En terme de portes logiques, la mesure d'un terme de Pauli nécessite seulement une complexité d'ordre $\mathcal{O}(1)$ puisqu'il est généralement possible d'effectuer des portes à un qubit en parallèle ainsi que des mesures simultanées des qubits. De manière plus concrète, afin de mesurer la valeur moyenne $\langle \hat{P}_j \rangle = \langle \hat{\sigma}_0^j \otimes \cdots \otimes \hat{\sigma}_{N-1}^j \rangle$, il ne suffit que de mesurer indépendamment chaque qubit i dans la base associée à $\hat{\sigma}_i^j$ et de corrélérer classiquement les résultats. Afin de mesurer dans la bonne base, des rotations sont appliquées avant la mesure de la façon suivante lorsque $\hat{\sigma}_i^j \neq \hat{I}$,

$$\begin{aligned} \hat{X} : \quad \langle \hat{X} \rangle &= \langle H \hat{Z} H \rangle, & \text{---} \boxed{H} \text{---} \boxed{\diagup} \\ \hat{Y} : \quad \langle \hat{Y} \rangle &= \langle G \hat{Z} G \rangle, & \text{---} \boxed{G} \text{---} \boxed{\diagup} \\ \hat{Z} : \quad \langle \hat{Z} \rangle &= \langle \hat{Z} \rangle. & \text{---} \boxed{\diagup} \end{aligned}$$

Ici, $H = (\hat{X} + \hat{Z})/\sqrt{2}$ est la porte Hadamard qui permet le passage de la base de \hat{Z} vers celle de \hat{X} et $G = (\hat{Y} + \hat{Z})/\sqrt{2}$ est la transformation équivalente entre \hat{Z} et \hat{Y} .

Estimation du nombre de mesures

Je m'intéresse maintenant au nombre de mesures nécessaires afin d'estimer $\langle \hat{H} \rangle$ avec une précision ϵ . L'analyse qui suit est basée sur les références [6, 65]. En mécanique quantique, calculer la valeur moyenne d'un opérateur nécessite de collecter les résultats d'une pluralité de mesures projectives issues de préparations d'état indépendantes. Je vais donc utiliser la notation $\widehat{\langle \hat{H} \rangle}$ pour noter l'estimateur de $\langle \hat{H} \rangle$, *i.e.* le résultat approximatif obtenu après un nombre fini de mesures⁸. Avec cette notation, la précision ϵ est donnée par la variance de l'estimation de la valeur moyenne de \hat{H} , c'est-à-dire

$$\epsilon^2 = \text{Var} [\widehat{\langle \hat{H} \rangle}]. \quad (2.30)$$

8. $\widehat{\langle \hat{H} \rangle} = \langle \hat{H} \rangle$ dans la limite où le nombre de mesures est infini.

Cette variance devrait tendre vers 0 lorsque le nombre de mesures va à l'infini. Considérons le cas général $\hat{H} = \sum_{j=1}^N h_j \hat{H}_j$, où $h_j \in \mathbb{R}$ et \hat{H}_j est un opérateur hermitien associé aux valeurs propres m_1 et m_2 et $\hat{H}_j^2 = \hat{I}$. Les opérateurs de Pauli en sont un cas particulier. Comme à l'équation (2.27), nous avons que cet estimateur est construit d'une somme d'estimateurs indépendants

$$\widehat{\langle \hat{H} \rangle} = \sum_{j=1}^N h_j \widehat{\langle \hat{H}_j \rangle}. \quad (2.31)$$

On cherche donc à calculer la variance de cette équation. En supposant que les \hat{H}_j sont échantillonnés à partir de préparations d'état indépendantes, la valeur de l'estimateur $\widehat{\langle \hat{H}_k \rangle}$ n'est pas corrélée à celle de $\widehat{\langle \hat{H}_l \rangle}$ si $k \neq l$. En d'autres mots, la covariance de ces quantités est nulle

$$\text{Cov}[\widehat{\langle \hat{H}_k \rangle}, \widehat{\langle \hat{H}_l \rangle}] = E[\widehat{\langle \hat{H}_k \rangle} \widehat{\langle \hat{H}_l \rangle}] - E[\widehat{\langle \hat{H}_k \rangle}] E[\widehat{\langle \hat{H}_l \rangle}] = 0 \quad \forall k \neq l. \quad (2.32)$$

Dans ce cas, la variance de l'équation (2.31) est donnée simplement par une somme de variances

$$\text{Var} [\widehat{\langle \hat{H} \rangle}] = \sum_{j=1}^N h_j^2 \text{Var} [\widehat{\langle \hat{H}_j \rangle}]. \quad (2.33)$$

Nous cherchons donc maintenant à obtenir une relation pour $\text{Var} [\widehat{\langle \hat{H}_j \rangle}]$. Si on effectue M_j mesures afin d'estimer $\langle \hat{H}_j \rangle$, le théorème de la limite centrale indique que

$$\text{Var} [\widehat{\langle \hat{H}_j \rangle}] = \frac{\text{Var} [\hat{H}_j]}{M_j}, \quad (2.34)$$

où $\text{Var} [\hat{H}_j] = \langle \hat{H}_j^2 \rangle - \langle \hat{H}_j \rangle^2 = 1 - \langle \hat{H}_j \rangle^2 \leq 1$ est la variance intrinsèque (incertitude quantique) du Hamiltonien \hat{H}_j . On peut donc récrire l'équation (2.33) comme

$$\epsilon^2 = \text{Var} [\widehat{\langle \hat{H} \rangle}] = \sum_{j=1}^N \frac{h_j^2 \text{Var} [\hat{H}_j]}{M_j} = \sum_{j=1}^N \frac{h_j^2 (1 - \langle \hat{H}_j \rangle^2)}{M_j}. \quad (2.35)$$

Afin d'avoir d'un estimé du nombre total de mesures nécessaires $M = \sum_{j=1}^N M_j$, supposons que chaque terme est mesuré $M_j = M/N$ fois. Dans ce cas, il est possible de renverser l'équation (2.35) pour obtenir une borne supérieure du nombre de mesures total en fonction de la précision souhaitée

$$M = N \sum_{j=1}^N \frac{h_j^2 (1 - \langle \hat{H}_j \rangle^2)}{\epsilon^2} \leq N \sum_{j=1}^N \frac{h_j^2}{\epsilon^2}. \quad (2.36)$$

Une approche plus pratique est de choisir $M_j \propto |h_j|$ comme il a été proposé dans la référence [90]. Ceci réduit l'estimé du nombre de mesures à

$$M = \sum_{j=1}^N M_j = \left(\frac{1}{\epsilon} \sum_{j=1}^N |h_j| \sqrt{1 - \langle \hat{H}_j \rangle^2} \right)^2 \leq \frac{\left(\sum_{j=1}^N |h_j| \right)^2}{\epsilon^2}, \quad (2.37)$$

ce qui a été prouvé être optimal par Rubin *et al.* [103]. Dans ce cas, le nombre de mesures estimé dépend de l'amplitude des coefficients du Hamiltonien. Dans la prochaine sous-section, je survolerai deux stratégies qui permettent de réduire d'autant plus cet estimé.

Stratégies pour réduire le nombre de mesures

Les estimés du nombre de mesures présentés aux équations (2.36) et (2.37) peuvent être problématiques lorsque la taille du système augmente. Par exemple, Wecker *et al.* [90] ont estimé que $\sim 10^{13}$ mesures devront être effectuées pour évaluer l'énergie de la molécule Fe_2S_2 avec ses 112 orbitales fermioniques. Heureusement, différentes stratégies ont été proposées afin de réduire le coût associé à la mesure. Ces stratégies peuvent d'ailleurs être employées conjointement. Premièrement, il y a la troncation de termes qui vise à éviter de mesurer les termes du Hamiltonien qui sont garantis de ne pas contribuer fortement à l'estimation totale de l'énergie [6]. Pour implémenter cette approche, il suffit d'ordonner les termes du Hamiltonien en ordre croissant de la norme de leur coefficients $|h_j|$, ce qui correspond à leur contribution maximale attendue à l'énergie. Cette série est alors tronquée à l'aide d'un seuil prédéterminé et l'estimation du nombre de mesures nécessaire se voit ajustée. Plus de détails sur cette approche se trouvent dans les références [6, 65].

Une deuxième stratégie consiste à partitionner le Hamiltonien de sorte que chaque groupe contienne uniquement des termes qui commutent. Ceux-ci peuvent ainsi être mesurés en séquence à partir de la même préparation d'état sans affecter l'estimation finale de l'énergie. Cette approche a été introduite par McClean *et al.* [6] et a depuis fait l'objet de recherches intensives. Plusieurs équipes ont proposé des heuristiques pour grouper les termes qui commutent, ce qui semble réduire le nombre de mesures d'un facteur constant [6, 50, 104, 105]. En appliquant des transformations unitaires supplémentaires au circuit, d'autres équipes ont réussi à réduire le nombre de partitions de $\mathcal{O}(N_{\text{orb.}}^4)$ à $\mathcal{O}(N_{\text{orb.}}^3)$ où $N_{\text{orb.}}$ est le nombre d'orbitales fermioniques du problème [106–111]. À ce jour, la meilleure stratégie proposée consiste à regrouper les termes au niveau fermionique plutôt qu'à celui des qubits [112]. Les auteurs ont développé une méthode permettant de mesurer les 2-RDM (2-body reduced density matrix), soit les termes fermioniques quartiques, en seulement $\mathcal{O}(N_{\text{orb.}}^2)$ préparations d'états au coût d'une profondeur de portes additionnelle de $\mathcal{O}(N_{\text{orb.}})$.

Malgré qu'on pourrait s'attendre à ce qu'il soit optimal de partitionner le Hamiltonien en le plus petit nombre de groupes de termes, ceci n'est pas toujours le cas. En effet, McClean *et al.* [6] ont montré qu'il est important de s'attarder à la covariance entre les termes au sein d'un groupe. De façon plus formelle, si plusieurs termes sont mesurés à partir de la même préparation d'état, leurs valeurs moyennes sont désormais corrélées et la variance totale (et donc la précision) n'est plus une simple somme de variances comme à l'équation (2.33), mais doit également tenir compte de la covariance entre les termes

$$\text{Var} [\langle \widehat{H} \rangle] = \sum_{i,j=1}^N h_i h_j \text{Cov}[\langle \widehat{H}_i \rangle, \langle \widehat{H}_j \rangle] = \sum_{j=1}^N h_j^2 \text{Var} [\langle \widehat{H}_j \rangle] + \sum_{i \neq j} h_i h_j \text{Cov}[\langle \widehat{H}_i \rangle, \langle \widehat{H}_j \rangle]. \quad (2.38)$$

Dans le cas général $\text{Cov}[\langle \widehat{H}_i \rangle, \langle \widehat{H}_j \rangle] \neq 0$. Cette covariance additionnelle peut être soit négative ou positive, ce qui résulte en une diminution ou une augmentation du nombre de mesures nécessaires afin de préserver une précision ϵ . Une attention particulière doit donc être portée lors de la partition du Hamiltonien. En pratique, partitionner le Hamiltonien requiert un prétraitement classique afin de grouper les termes qui commutent à l'aide d'algorithmes de tri qui accomplissent la tâche en $\mathcal{O}(N^2)$ tests de commutation entre les paires de termes [113]. D'autant plus, il est nécessaire de vérifier si une partition donnée augmente ou diminue le nombre de mesures. Ceci requiert une bonne approximation de l'état quantique cible puisque les covariances dépendent de l'état. Cela implique qu'afin de trouver les partitions optimales, nous nous devons d'accéder à une approximation classique précise de l'état d'intérêt, ce qui représente généralement un défi de taille.

Une condition plus stricte sur le regroupement serait d'imposer que chaque terme commute qubit-à-qubit [50]. Par exemple, l'ensemble $\{ZIX, IYX, ZYI\}$ de termes qui commutent fonctionnerait, contrairement à $\{ZXX, IYY, ZII\}$. Ceci garantit que toutes les valeurs moyennes au sein d'un ensemble peuvent être obtenues à partir de la même préparation d'état, suivie d'un ensemble spécifique de portes à un qubit permettant de mesurer dans la bonne base. En somme, il est à noter qu'aucune stratégie de regroupement de terme commutant ne va pas altérer le résultat final, même si les groupes sont choisis de manière non-optimale. Il ne s'agit que d'une technique permettant de réduire le coût d'échantillonnage du Hamiltonien.

2.2.6 Optimisation classique

Le coût en calcul des algorithmes variationnels quantiques est associé à trois facteurs : la profondeur de la forme variationnelle, la mesure de la valeur moyenne du Hamiltonien du

problème et le nombre d'appels à la fonction objectif de la routine d'optimisation classique. Je rappelle que la fonction objectif correspond à une mesure de $\langle \hat{H} \rangle$ sur l'ordinateur quantique. Ce dernier est un aspect crucial des VQA, car il détermine le nombre de préparations d'états à chaque itération.

Dans le contexte des VQA, l'optimiseur classique doit minimiser une fonction non-linéaire compliquée dans un espace de paramètres à haute dimension. Malgré la difficulté de cette tâche, l'optimisation se doit d'être rapide et précise tout en étant robuste au bruit inévitable des processeurs NISQ. Pour y parvenir, on fait souvent appel à une méthode de minimisation standard issue d'une vaste littérature et dont plusieurs font partie de bibliothèques de logiciels largement répandues comme `scipy.optimize`. Face à l'offre abondante d'algorithmes, il est primordial de sélectionner celui qui sera le mieux adapté au contexte de l'expérience, ce qui n'est *a priori* pas un choix trivial. Pour cette raison, plusieurs études comparatives exposent les avantages et désavantages des différentes approches dans divers contextes [6, 114]. Certaines de ces méthodes ont d'ailleurs été adaptées au contexte des VQA en employant des tactiques permettant de mesurer le gradient de la fonction objectif à même le processeur quantique [59, 115–117].

Les algorithmes d'optimisation se séparent essentiellement en deux catégories : la recherche directe et les méthodes à base de gradient. Pour cette dernière, le gradient peut provenir d'une expression analytique ou d'un calcul numérique nécessitant généralement plusieurs appels à la fonction objectif. Les algorithmes de recherche directe sont considérés plus robustes contre le bruit que les méthodes à base de gradient, mais en contre-partie elles peuvent demander plus d'évaluations de la fonction objectif [118].

Dans les implémentations expérimentales actuelles des VQA, la précision de l'optimisation est limitée par le bruit ainsi que par l'erreur statistique issue du nombre fini de mesures. Pour cette raison, la plupart des expériences font appel à des méthodes de recherche directe qui sont mieux adaptées pour tolérer ces fluctuations. Par exemple, la première démonstration expérimentale d'un VQA [5] a utilisé la méthode Nelder-Mead qui est une simple routine d'optimisation sans gradient [119]. Cependant, cet algorithme a été surpassé [6, 114] par d'autres méthodes de recherche directe ainsi que par l'algorithme à base de gradient de Broyden, Fletcher, Goldfarb et Shanno (L-BFGS-B) [120]. Plus récemment, l'algorithme *simultaneous perturbation stochastic approximation* (SPSA) [121–123] a été appliqué afin de trouver l'énergie fondamentale de petites molécules [50, 96]. Cette méthode utilise deux appels à la fonction objectif pour trouver numériquement une approximation linéaire du gradient dans une direction aléatoirement choisie. Certains groupes ont également exploré la possibilité d'utiliser des réseaux de neurones classiques entraînés sur plusieurs instances du problème pour apprendre les hyper-paramètres des optimiseurs (*metalearning*) [124, 125].

Dans mon projet, j’ai employé la méthode de recherche directe (sans gradient) *Constrained Optimization BY Linear Approximation* (COBYLA) développée par Powell [126–128]. Cette dernière se base sur des approximations linéaires pour générer un modèle approximatif de la fonction objectif à base de simplexes. Il s’agit d’une amélioration par rapport à l’algorithme des simplexes original [129]. COBYLA est principalement conçue pour des calculs avec contraintes, mais peut également être appliquée sur des problèmes sans contraintes, comme c’est le cas pour les VQA. Des détails techniques sur la méthode COBYLA se trouvent dans les références [128, 130]. Étant donné que le but du projet est davantage de comparer les performances des différentes formes variationnelles dans des conditions numériques similaires, peu d’attention a été portée sur le choix et l’ajustement de l’optimiseur classique. En effet, même si les résultats pourraient bénéficier d’une routine d’optimisation alternative, il n’est pas garanti que ce changement demeurera un avantage dans le contexte d’une réelle expérience, où le bruit jouera un rôle majeur.

2.2.7 Implémentation numérique des VQA avec Qiskit

Les ordinateurs quantiques actuels sont encore trop petits et bruyants pour exécuter des algorithmes d’intérêt pratique. Malgré la venue de dispositifs quantiques repoussant les frontières du calcul classique [3], il est souvent possible de simuler classiquement le comportement de processeurs quantiques plus performants que ceux disponibles en laboratoire. Cette époque marque un terrain de jeu excitant pour les développeurs d’algorithmes quantiques puisqu’il leur est possible de tester leurs avancées sans devoir accéder à un véritable ordinateur quantique. De plus, pour les mêmes raisons, il est souvent possible de vérifier exactement les résultats d’un calcul quantique, ce qui ne sera plus le cas lorsque les calculateurs quantiques surpasseront systématiquement leur contrepartie classique.

À ces fins, plusieurs compagnies et groupes académiques ont développé des outils numériques adaptés à la recherche en informatique quantique. Ces bibliothèques de logiciels incorporent couramment des simulateurs réalistes de processeurs quantiques dans le but de faciliter le développement algorithmique. De plus, on y trouve souvent des outils permettant d’interfacer avec de réels ordinateurs quantiques lorsque la compagnie offre un service d’informatique en nuage (*cloud computing*). Pour nommer quelques exemples de logiciels *full-stack* libres, on trouve

- **Qiskit**, par *IBM Quantum*,
- **Cirq**, par *Google AI Quantum*,
- **Forest** par *Rigetti Computing*,
- **Ocean** par *D-Wave Systems*,

- **Q#** par *Microsoft*,
- **StrawberryFields** par *Xanadu*

Une liste plus exhaustive se trouve à l'adresse qosf.org.

Qiskit : *Quantum Information Science Kit*

Pour mon projet, j'ai opté pour les outils en Python offerts par Qiskit, une bibliothèque de logiciels libre permettant de travailler avec les ordinateurs quantiques au niveau des circuits, des impulsions micro-ondes et des algorithmes. En survole, Qiskit est composé de quatre "éléments" : *Terra*, *Aer*, *Ignis* et *Aqua*. Le premier, *Terra*, sert de fondation pour le reste des éléments. Ses fonctionnalités comprennent notamment la composition de programmes quantiques au niveau logique (portes) et sub-logique (impulsions micro-ondes sur les dispositifs physiques) ainsi qu'une interface permettant de lancer des expériences sur de réels processeurs quantiques ou des simulateurs. Ces simulateurs sont incorporés dans *Aer*, qui fournit les outils nécessaires pour simuler de façon réaliste et efficace le comportement d'un ordinateur quantique. Avec *Aer*, il est également possible d'ajouter des modèles réalistes de bruit aux simulations. *Ignis* est la plus récente addition à Qiskit. Son but est de faciliter le développement de codes de correction d'erreurs, la caractérisation des dispositifs quantiques, la mitigation des erreurs, l'amélioration des portes logiques ainsi que l'exploration du découplage dynamique et du contrôle optimal. Finalement, on trouve *Aqua* qui regroupe les outils nécessaires au développement d'applications aux ordinateurs quantiques. On y trouve notamment certains algorithmes quintessentiels de l'informatique quantique comme ceux de Shor, Grover et l'estimation de phase, mais également des outils haut-niveau adaptés aux experts en chimie, optimisation, finance et intelligence artificielle. *Aqua* inclut notamment des outils pour la conception d'algorithmes variationnels quantiques.

Afin de clarifier le fonctionnement symbiotique de ces éléments, je donne en guise d'exemple, mon flux de travail portant sur les algorithmes variationnels quantiques. Tout d'abord, les formes variationnelles que je développe prennent la forme de circuits quantiques paramétrés compilés dans *Terra*. Ces derniers sont incorporés à la classe `VariationalForm` de *Aqua*, ce qui leur permet d'être utilisés dans la boucle des VQA, également codée dans *Aqua*. Dans cette boucle, on trouve des implémentations de différents encodages du problème et routines d'optimisation classiques. Afin de lancer l'algorithme, il est nécessaire de spécifier un backend, soit le moteur qui permet d'interpréter et exécuter les programmes quantiques. Celui-ci peut soit être un ordinateur quantique réel ou un simulateur numérique. Dans le cas où on choisit de simuler l'algorithme, on fait appel aux outils de *Aer* en spécifiant les options souhaitées aux simulateurs, comme par exemple l'ajout de bruit. Les rouages sous-jacents des simulateurs sont du code C++ optimisé qui se charge d'effectuer les multi-

plication de matrices unitaires correspondant aux portes quantiques du circuit. À ce jour, trois options de simulateurs existent dans *Aer* : le `Statevector_Simulator` qui retourne directement l'état quantique final du circuit, le `Qasm_Simulator` qui retourne un histogramme de comptes suite à plusieurs répétitions du circuit et finalement le `Unitary_Simulator` qui retourne la matrice unitaire correspondant au circuit. Un avantage de la construction de Qiskit et de l'interaction entre ses éléments est la facilité à passer d'un simulateur local à un vrai processeur quantique sur le nuage. Souvent, ce passage s'effectue en ne modifiant qu'une seule ligne de code.

2.3 Contrôle optimal quantique

Les idées introduites dans l'article de la section 3.2 sont en partie inspirées de la théorie du contrôle optimal quantique. Cette section a donc pour but de survoler certains concepts clés de cette théorie qui permettent de comprendre les motivations derrière QOCA (*Quantum-optimal-control-inspired Ansatz*). Étant donné que mon projet ne porte pas entièrement sur le contrôle optimal quantique, je serai bref dans mes explications.

La théorie du contrôle quantique décrit comment il est possible de contrôler un système quantique et a été développée au cours des quatre dernières décennies [131]. L'idée de base de cette théorie réside dans la possibilité de générer des opérations quantiques souhaitées à même un système expérimental en le connectant à des appareils de contrôle, ces derniers générant par exemple des impulsions électromagnétiques dont les paramètres peuvent être ajustés. L'étendue des opérations réalisables (et donc des états quantiques atteignables) du système contrôlé est caractérisée par sa contrôlabilité. L'étude de ce concept nous montrera qu'ajouter des termes qui ne commutent pas avec le Hamiltonien du problème dans QOCA nous permet d'atteindre des états couvrant un espace de Hilbert agrandi.

Le contrôle optimal quantique, de son côté, donne les méthodes pour concevoir les impulsions de contrôle de sorte à minimiser la valeur d'une fonction objectif. Cette dernière peut tenir compte, par exemple, du temps et de la fidélité de l'opération quantique souhaitée. Cette théorie a notamment été appliquée au contrôle quantique de réactions chimiques [132, 133], de spins en résonance magnétique nucléaire [134, 135] et plus récemment aux qubits supraconducteurs [136].

Les concepts théoriques présentés ici sont en partie tirés du livre *Introduction to Quantum Control and Dynamics* de Domenico D'Alessandro [137].

2.3.1 Contrôlabilité des systèmes quantiques

Cette section requiert certaines connaissances de base en théorie des représentations que je n'introduis pas dans le cadre de ce mémoire. Cependant, elle n'est pas nécessaire à la compréhension de l'article de la section 3.2 et le lecteur peut donc passer directement à la section 2.3.2.

Pour cette section, je demeure très général en considérant un système quantique décrit par le Hamiltonien contrôlé dépendant du temps $\hat{H}(u)$ agissant dans un espace de Hilbert de dimension n . Les fonctions de contrôle u peuvent elles-mêmes dépendre du temps. L'équation de Schrödinger, sous sa forme la plus générale, associée à cet Hamiltonien est donnée par ($\hbar = 1$)

$$\dot{\hat{U}}(t) = -i\hat{H}(u)\hat{U}(t), \quad \hat{U}(0) = I_{n \times n}, \quad (2.39)$$

où sa solution, $\hat{U}(t)$, permet de propager des états purs dans le temps comme $|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t)|\psi(0)\rangle$ et $I_{n \times n}$ est l'opérateur identité. Le système décrit par $\hat{H}(u)$ est dit contrôlable si l'ensemble des matrices pouvant être obtenues en résolvant l'équation (2.39) est l'ensemble de toutes les matrices unitaires de $SU(n)$. En d'autres termes, le système est contrôlable si, pour tout état initial $|\psi(0)\rangle$, il existe un ensemble de contrôles u et un temps $T > 0$ pour lequel l'état $|\psi(T)\rangle$ peut être n'importe quel état de l'espace de Hilbert à n dimensions.

Un concept important est l'ensemble des états accessibles dont la définition est

Définition. L'ensemble des états atteignables à l'instant $T > 0$ pour le système (2.39), $\mathcal{R}(T)$, est l'ensemble de toutes les matrices unitaires \bar{U} telles qu'il existe des contrôles $u \in \bar{\mathcal{U}}$, avec $\bar{\mathcal{U}}$ un ensemble de fonctions et $\hat{U}(T, u) = \bar{U}$. Et donc, l'ensemble des états atteignables $\forall T$ est défini comme

$$\mathcal{R} = \cup_{T \geq 0} \mathcal{R}(T). \quad (2.40)$$

Afin de simplifier l'optimisation des fonctions de contrôle, nous prenons $\bar{\mathcal{U}}$ comme étant l'ensemble des fonctions constantes par pièces. Ce choix correspond également à une Trotterization de l'évolution temporelle sous le Hamiltonien contrôlé.

Le test principal de contrôlabilité du système (2.39) est celui de l'algèbre de Lie dynamique et est donné par le théorème 3.2.1 de [137] :

Théorème. L'ensemble des états atteignables pour le système (2.39) est le groupe de Lie associé à l'algèbre de Lie \mathcal{L} généré par $\text{span}_{u \in \bar{\mathcal{U}}} \{-i\hat{H}(u)\}$. En bref,

$$\mathcal{R} = e^{\mathcal{L}}, \quad (2.41)$$

où le groupe de Lie $e^{\mathcal{L}}$ est défini comme $e^{\mathcal{L}} \equiv \{e^{A_1}e^{A_2} \dots e^{A_m}, \quad A_1A_2, \dots, A_m \in \mathcal{L}\}$.

L'algèbre de Lie \mathcal{L} est appelée **algèbre de Lie dynamique** associée au système. Le système est contrôlable si $\dim(\mathcal{L}) = n^2 = \dim(u(n))$, où n est la taille de l'espace de Hilbert et $u(n)$ est l'algèbre de Lie des matrices anti-hermitiennes $n \times n$. Ceci est équivalent à dire que $\mathcal{L} = u(n)$ ou encore $e^{\mathcal{L}} = U(n)$, où $U(n)$ est le groupe de Lie des matrices unitaires de dimension n . On dit aussi que le système est contrôlable lorsque $\dim(\mathcal{L}) = n^2 - 1 = \dim(su(n))$, où $su(n)$ est l'algèbre de Lie des matrices de $u(n)$ avec trace nulle, ou de manière équivalente lorsque $\mathcal{L} = su(n)$ ou $e^{\mathcal{L}} = SU(n)$, avec $SU(n)$ le groupe des matrices de $U(n)$ avec un déterminant égal à un. Ceci revient à dire que tout état quantique est défini à une phase globale près puisque $U(n) = U(1) \times SU(n)$.

L'algèbre de Lie dynamique du système, \mathcal{L} , peut être générée de manière itérative en prenant tous les commutateurs (éventuellement répétés) des éléments de \mathcal{L} et en les ajoutant à \mathcal{L} lorsqu'une nouvelle matrice est trouvée. Pour plus de détails et d'exemples sur cette procédure, voir la section 3.2.1 de [137]. De par cette procédure, $\dim(\mathcal{L})$, et donc l'ensemble des états atteignables \mathcal{R} , augmente pour chaque nouvel Hamiltonien de contrôle ajouté à l'ensemble qui génère un nouveau terme. Ceci se produit lorsque le nouvel élément ne commute pas avec ceux déjà présents.

Cela montre que l'ajout de termes de contrôle qui ne commutent pas avec le Hamiltonien du problème dans une forme variationnelle inspiré de la physique (section 2.2.4) peut augmenter l'ensemble des états variationnels atteignables et donc augmenter la taille de l'espace de Hilbert exploré par la fonction d'onde.

2.3.2 GRAPE : Un algorithme de contrôle optimal quantique

Le contrôle optimal au sens général offre un ensemble de méthodes puissantes par lesquelles le contrôle s'effectue de manière efficace [138–141]. Un exemple connu d'une telle méthode appliquée au contrôle quantique est l'algorithme GRAPE [135, 136].

Dans le cas d'un système quantique de Hamiltonien \hat{H}_0 , le contrôle est réalisé en couplant le système à un ou plusieurs appareils de contrôle. Les interactions avec ces derniers sont spécifiées par un ensemble de Hamiltoniens $\{\hat{H}_k\}$ indépendants du temps contrôlés *via* un ensemble de fonctions $\{u_k(t)\} \in \mathbb{R}$. Le Hamiltonien total $\hat{H}(t)$ est, en général, dépendant du temps tel que

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \sum_{k=1}^M u_k(t) \hat{H}_k. \quad (2.42)$$

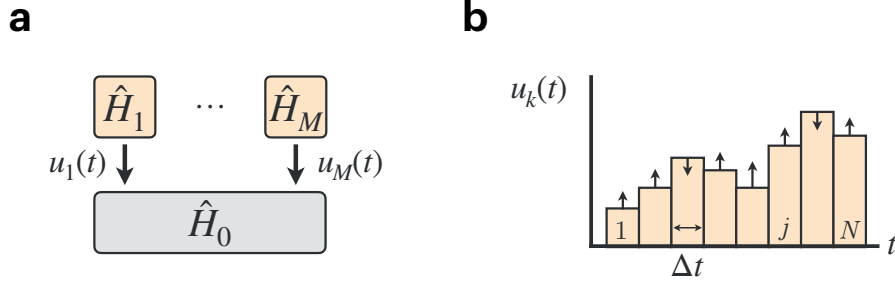


FIGURE 2.5 **a** Un système quantique \hat{H}_0 est contrôlé en le couplant à un ensemble de Hamiltoniens de contrôle $\{\hat{H}_k\}$. Le contrôle s'effectue *via* un ensemble de fonctions réelles $\{u_k(t)\}$ et le Hamiltonien total du système est donné par l'équation (2.42). **b** Un champ de contrôle $u_k(t)$ est discrétisé en N pixels d'une durée Δt comme à l'équation (2.44). L'algorithme d'optimisation s'effectue en ajustant itérativement la valeur des $\{u_{k,j}\}$ de sorte à minimiser un fonctionnelle objectif. Ce processus est indiqué par les flèches verticales.

Cet Hamiltonien contrôlé est présenté schématiquement à la figure 2.5.a. Comme à la section précédente, la solution de l'équation de Schrödinger du système contrôlé,

$$\dot{\hat{U}}(t) = -i[\hat{H}_0 + \sum_k u_k(t)\hat{H}_k]\hat{U}(t), \quad \hat{U}(0) = I, \quad (2.43)$$

est la matrice unitaire $\hat{U}(t)$, qui peut propager des états purs dans le temps comme $|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t)|\psi(0)\rangle$.

La forme exacte de $\hat{U}(t)$ est en général difficilement calculable puisque le Hamiltonien dépend du temps. Dans l'algorithme GRAPE, le temps est discrétisé en N incréments, ou pixels, de durée Δt de sorte que l'évolution temporelle totale se produise dans un temps $T = N\Delta t$. Cette discrétisation peut par exemple correspondre à la fréquence d'échantillonnage de l'électronique de commande dans le cas d'une expérience. Grâce à cette discrétisation, les champs de contrôle continu $u_k(t)$ sont maintenant paramétrés par les nouveaux champs de contrôle discret $\mathbf{u}_k = \{u_{k,j}\}$ comme

$$u_k(t) = \sum_{j=1}^N u_{k,j} \Pi_j(t, \Delta t), \quad (2.44)$$

où $\Pi_j(t, \Delta t) \equiv \Theta(t - j\Delta t) - \Theta(t - (j+1)\Delta t)$ où Θ est la fonction de Heaviside. Puisque durant l'intervalle Δt le Hamiltonien est indépendant du temps, l'opérateur d'évolution

temporelle pour un temps T est donné par

$$\hat{U}(T) = \prod_{j=1}^N \exp \left[-i\Delta t \left(\hat{H}_0 + \sum_k u_{k,j} \hat{H}_k \right) \right]. \quad (2.45)$$

L'idée derrière un algorithme de contrôle optimal quantique est d'ajuster itérativement la valeur des $\{u_{k,j}\}$ de sorte à minimiser un fonctionnelle objectif. Cette procédure est présentée schématiquement à la figure 2.5.b. Un exemple de fonctionnelle objectif est la fidélité entre un état cible $|\Omega\rangle$ et l'état contrôlé, initialement dans $|\psi_0\rangle$,

$$\mathcal{C}[t, \{u_{k,j}\}] \equiv |\langle \Omega | \hat{U}(t, \{u_{k,j}\}) | \psi_0 \rangle|^2. \quad (2.46)$$

Parce que le propagateur (2.45) incorpore des termes de contrôle $\{\hat{H}_k\}$, qui ne commutent généralement pas avec le Hamiltonien \hat{H}_0 , $\hat{U}(T)$ peut implémenter des opérations unitaires distinctes de celles générées par \hat{H}_0 seulement. Dans les problèmes standards de contrôle optimal quantique, une optimisation rapide et efficace des champs de contrôle est possible puisque l'état (ou l'opération) cible est connu. L'adaptation de ces techniques aux algorithmes variationnels quantiques nécessite cependant de faire fi de toute information sur l'état cible de la fonctionnelle objectif, ce qui rend l'optimisation plus compliquée.

Néanmoins, il est possible de s'inspirer du succès du contrôle optimal quantique en incorporant des Hamiltoniens de *contrôle* dans des formes variationnelles qui imitent l'évolution temporelle, comme le VHA. Ceci correspond à l'approche empruntée pour le développement de QOCA.

Chapitre 3

Un Ansatz brisant les symétries

3.1 Contexte

Avant de présenter mes résultats dans l'article de la section 3.2, je présente le contexte scientifique dans lequel ma recherche s'insère. Comme mentionné précédemment, l'article traite d'une nouvelle forme variationnelle servant à résoudre des problèmes statiques fermioniques à l'aide d'algorithmes quantiques variationnels. Puisqu'il est inspiré du contrôle optimal quantique, je l'appelle le *Quantum-Optimal-Control-inspired Ansatz*, ou QOCA. Je commence par expliquer les étapes chronologiques qui ont menées à son invention et j'élabore ensuite sur la motivation scientifique derrière QOCA.

3.1.1 Origine et progression du projet

Au sein du groupe du professeur Blais, mon projet figure parmi les premiers d'un nouvel axe de recherche portant sur la simulation quantique. Néanmoins, l'expertise établie du groupe Blais s'est avérée cruciale au développement des idées novatrices derrière QOCA, car elles proviennent de techniques de contrôle optimale quantique couramment employées dans les circuits supraconducteurs. Originellement, le projet est issu d'une connexion entre Dr. Agustin Di Paolo (Sherbrooke) et Dr. Panagiotis Barkoutsos (IBM Research Zürich), les deux étudiant au doctorat à l'époque. Ce dernier s'intéressait aux algorithmes variationnels quantiques et a proposé au groupe sherbrookoise une collaboration. Deux projets en ont résulté : le premier, mené par A. Di Paolo, exploite un VQA pour résoudre un problème d'optique quantique où le couplage lumière-matière est très fort [67], et le deuxième porte sur le modèle de Fermi-Hubbard et fait l'objet de ce mémoire.

Le but initial de mon projet est d’adopter une construction heuristique [50] de la FOV d’un VQA afin de résoudre le modèle de Hubbard sur un réel ordinateur quantique de IBM. Afin de rendre nos résultats convaincants, nous nous attardons à un régime particulièrement difficile du modèle de Hubbard, soit le demi-remplissage à couplage intermédiaire, comme mentionné dans la section 2.1. Alors que les résultats sont prometteurs pour 2 sites fermioniques (2×1), nous frappons un mur en augmentant la taille du système à une plaquette 2×2 , où la convergence est beaucoup plus difficile, voire inexistante. Il devient donc clair que cette approche heuristique ne produit pas les résultats espérés pour de plus gros systèmes. Cette observation est aussitôt corroborée par la publication de McClean *et al.* [94] indiquant que la convergence de ce type de formes variationnelles devient exponentiellement difficile alors que la taille du problème croît. Cela tourne ainsi notre attention vers des fonction d’ondes structurées autour du Hamiltonien à résoudre comme le *Variational Hamiltonian Ansatz* (VHA) introduit par Wecker *et al.* [90] et présenté brièvement à la section 2.2.4 ainsi que dans l’article.

De façon surprenante, dans le cas du modèle de Hubbard 2×2 à demi-remplissage, le VHA n’améliore la convergence de l’algorithme. Ceci motive l’investigation du FT-VHA, une variante du VHA où la forme variationnelle alterne de base à chaque étape au moyen d’une transformation de Fourier fermionique. Bien que suggéré indépendamment par notre groupe, cette approche a récemment été formulée dans le cadre des VQA par Babbush *et al.* [91] et est expliquée dans l’article. Malheureusement, cette méthode n’améliore également pas la convergence. Il s’avère que la performance du VHA (et du FT-VHA) dépend grandement de l’état initial utilisé pour l’algorithme, et produit les meilleurs résultats seulement lorsque ce dernier est non-trivial. J’élabore davantage sur ce point à la prochaine section.

C’est face à ces résultats décourageant que, suite à des discussions avec le professeur David Poulin, nous entamons notre développement de QOCA. J’applique alors cette nouvelle fonction d’onde d’essai aux tailles 2×1 , 2×2 ainsi que 2×3 du modèle de Hubbard et obtiens convergence dans tous les cas. D’autant plus, QOCA semble robuste à l’initialisation de la forme variationnelle puisque sa performance demeure grande même lorsque l’état initial change. Afin de tester l’étendue de l’applicabilité de QOCA, je l’utilise pour trouver l’état fondamental de la molécule H_2O avec un succès comparable à l’état-de-l’art en chimie quantique. En conséquence de ces résultats prometteurs, un brevet est déposé concernant l’invention de QOCA.

3.1.2 Motivation derrière QOCA

Contrairement aux circuits provenant d’algorithmes exacts comme l’estimation de phase quantique, la construction d’une fonction d’onde d’essai dans le cadre d’un VQA ne fournit aucune garantie de succès. En effet, le mieux qu’on puisse faire soit de poser une hypothèse éduquée quant à la structure qui maximisera la probabilité de converger vers l’état recherché. À ma connaissance, il n’existe pas à ce jour de résultat analytique révélant l’arrangement de portes ainsi que la valeur des paramètres qu’on doit utiliser pour préparer l’état fondamental de problèmes difficiles. Ceci étant dit, un tel arrangement doit exister puisqu’il a été prouvé que les algorithmes variationnels sont *universels*, signifiant qu’il est en principe possible de préparer n’importe quel état quantique avec une précision arbitraire [142, 143]. Cependant, en pratique il peut être exponentiellement difficile d’atteindre un état quantique donné.

Cette dernière affirmation est parfaitement illustrée par l’enjeu des plateaux arides (*barren plateaus*) [94] dont souffrent les formes variationnelles à construction heuristique (voir section 2.2.4). On en conclut que même si ces FOV sont près d’être universelles de par leur grande expressibilité [95], elles sont exponentiellement plus difficiles à converger à mesure que la taille du problème augmente. En d’autres mots, l’espace de Hilbert est grand et son exploration non structurée est difficile même pour un ordinateur quantique.

Heureusement, souvent il n’est pas nécessaire d’explorer tout l’espace de Hilbert, car certaines symétries de l’état cible peuvent être connues *a priori*. C’est ce que tentent d’exploiter les FOV structurées autour du problème (PIA¹) en conservant les symétries imposées par le Hamiltonien. Ceci réduit l’exploration de l’espace de Hilbert à un petit secteur d’intérêt, ce qui en principe simplifie la recherche variationnelle. Pour cette raison, les PIA peuvent techniquement mener à une convergence plus rapide qu’une méthode heuristique et ont davantage de chance de fonctionner pour de plus gros systèmes. Par contre, il se peut que supposer trop de connaissance par rapport au problème soit nuisible à la performance de la forme variationnelle.

Lacunes des formes variationnelles inspirées du problème (PIA)

Voici quelques arguments informels qui soulèvent des doutes quant à l’étendue de l’utilité des PIA. Premièrement, si une symétrie préalablement inconnue se voit brisée dans l’état fondamental d’un problème à résoudre, un PIA éprouverait de la difficulté à générer l’ordre ainsi créé si sa construction ne considère pas cette symétrie brisée. Par exemple, si la solution d’un modèle d’Ising comporte un ordre anti-ferromagnétique, une fonction d’onde

1. *Physics-Inspired-Ansatz* ou *Problem-Inspired-Ansatz*.

ne simulant pas un champ magnétique alterné aurait de la difficulté à induire cet ordre dans l'état variationnel. L'ajout de termes simulant cette brisure de symétrie est d'ailleurs une technique couramment utilisée en simulation classique de systèmes quantiques.

Deuxièmement, comme il est démontré dans l'article, les PIA sont extrêmement sensibles à l'état initial utilisé dans le VQA. En effet, même si l'état initial se trouve dans le même secteur de symétrie que l'état cible, il n'est pas assuré qu'une forme variationnelle respectant ces symétries pourra le faire converger. Cette constatation a d'énormes implications, car cela signifie que les PIA éprouvent possiblement des difficultés à efficacement connecter les états à même le petit sous-espace de Hilbert qu'ils considèrent. D'autant plus problématique, il se peut que l'état de référence pour lequel le PIA converge nécessite une préparation non-triviale, ce qui contribuerait significativement au coût de l'algorithme. Un exemple d'une situation où cela est le cas est présenté dans l'article.

Finalement, le circuit quantique d'un PIA n'est peut-être pas robuste face au bruit du processeur quantique et plus particulièrement aux erreurs qui sortiraient l'état variationnel du secteur de symétrie d'intérêt. Par exemple, une erreur commune chez les qubits supraconducteurs comme la perte de photon entraînerait l'état quantique en dehors du sous-espace de Hilbert à nombre de particules fixe. Une FOV respectant cette symétrie ne comporte pas de termes permettant de changer le nombre de particules et sera donc incapable de variationnellement corriger l'erreur. La préparation d'état où l'erreur a surgi deviendrait alors inutile. Il est pertinent de noter que l'ajout de termes brisant la symétrie du nombre de particule a déjà été proposé dans le cadre de la suppression variationnelle d'erreurs pour des problèmes fermioniques [6].

QOCA : une forme variationnelle structurée plus flexible

Les constatations de la section précédente soulèvent l'intérêt d'une classe de formes variationnelles qui tirent profit des avantages des constructions heuristiques ainsi que des PIA. C'est ce que nous proposons avec l'introduction de QOCA. Cette nouvelle FOV est structurée autour du problème, mais présente une plus grande flexibilité que les PIA dû à l'incorporation d'unitaires brisant légèrement les symétries du problème. Cet ajout permet une recherche variationnelle dans un espace de Hilbert légèrement plus grand que celui généré par les symétries du problèmes, comme c'est le cas pour les approches heuristiques.

Une recherche agrandie permettrait l'emprunt de raccourcis qui aideraient l'état variationnel à s'échapper de minimums locaux dans l'espace de Hilbert. Ce comportement est schématisé à la figure 3.1a où on y voit des chemins hypothétiques parcourus par les formes variationnelles introduites précédemment. Dans cette figure, un sous-espace à nombre de

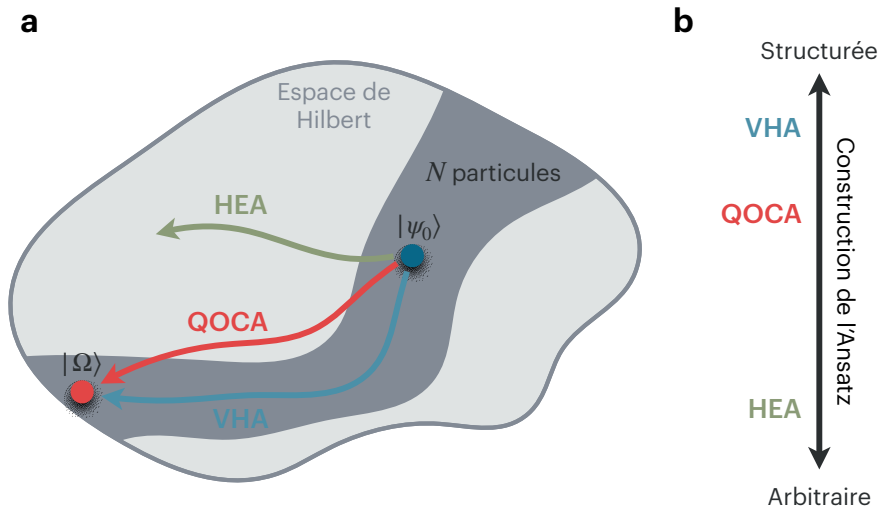


FIGURE 3.1 Comparaison de différentes formes variationnelles quant à leur structure autour du problème. **a** Schéma de parcours possibles dans l'espace de Hilbert pour une FOV à construction heuristique (HEA), le *Variational Hamiltonian Ansatz* (VHA) ainsi que le *Quantum-optimal-control-inspired Ansatz* (QOCA). L'état initial $|\psi_0\rangle$ ainsi que l'état cible $|\Omega\rangle$ se trouvent dans le même secteur de symétries contenant N particules. Puisque HEA ne conserve pas les symétries du Hamiltonien \hat{H} , son parcours s'échappe facilement du sous-espace à nombre de particules fixe. Au contraire, VHA est restreint à conserver les symétries de \hat{H} et ne peut donc pas s'échapper de ce secteur. En introduisant des termes brisant les symétries de \hat{H} , QOCA a la possibilité de sortir légèrement du sous-espace à N particules pour ainsi trouver des raccourcis dans l'espace de Hilbert. **b** Classement approximatif des FOV selon leur niveau de structure par rapport au Hamiltonien du problème.

particules fixe est mis en évidence. On constate que le VHA est restreint à cette zone et la recherche variationnelle qui en découle est forcée de suivre les contours de cette variété. Puisque l'approche heuristique ne conserve pas les symétries du problème, son parcours n'a pas de difficulté à s'échapper du sous-espace de Hilbert. Par contre, le manque de structure du HEA le rend plus susceptible de diverger sans jamais trouver l'état fondamental. En ne brisant que légèrement les symétries du problème, QOCA a la possibilité de sortir du sous-espace, ce qui lui permet de générer en principe des parcours plus directs, et donc une convergence plus rapide. À la figure 3.1b, je classe ces mêmes formes variationnelles selon la symétrie de la structure de leurs circuits. Aux extrêmes on trouve VHA, qui conserve toutes les symétries du Hamiltonien, et à l'opposé, HEA qui a une construction arbitraire. Je place QOCA entre les deux, mais plus près de VHA, car la majeure partie de ses circuits conserve les symétries.

Des VQA pour le modèle de Fermi-Hubbard

L'état fondamental du modèle de Hubbard a déjà été étudié au moyen d'algorithmes variationnels quantiques. En voici quelques exemples : Dans l'article original du VHA, Wecker *et al.* [90] considéraient le FHM à demi-rempli jusqu'à 12 sites fermioniques. Dallaire-Demers *et al.* [93] ont développé le *low-depth-circuit ansatz* (LDCA) pour le FHM et l'ont appliqué avec succès à quatre sites au demi-remplissage. Reiner *et al.* [144] ont utilisé la méthode VHA sur de petits amas jusqu'à 3×3 et ont étudié l'effet des rotations excédentaires comme modèle simple de bruit. Verdon *et al.* [124] ont utilisé des réseaux de neurones récurrents pour optimiser les paramètres du VHA et ont appliqué la technique à des systèmes de taille 2×2 , 2×3 et 2×4 . En utilisant une technique similaire, mais avec le HEA, Wilson *et al.* [125] se sont attaqués au FHM sans spin à trois sites. Dans une étude complète des aspects d'un VQA, Cade *et al.* [145] ont développé une généralisation du VHA, qu'ils appellent le *number-preserving Ansatz*, et l'ont appliqué sur le FHM pour un maximum de 12 sites à l'écart du demi-remplissage. Xu *et al.* [146] ont introduit une variante de la forme variationnelle UCC [147] pour le FHM et l'ont appliquée à un système de taille 2×2 . Dans une étude portant davantage sur la chimie quantique, Sokolov *et al.* [148] ont appliqué la FOV UCCSD au modèle de Hubbard à quatre sites. Plus récemment, Dallaire-Demers *et al.* [25] ont développé une approche heuristique adaptée au processeur Sycamore de Google pour résoudre le FHM en 1D pour un maximum de 8 sites. Finalement, Montanaro *et al.* [149] ont utilisé les symétries du FHM pour créer une version compacte du problème et ont appliqué expérimentalement la technique au modèle de Hubbard à deux sites.

Face à cette littérature grandissante, certaines tendances ressortent. Premièrement, la plupart des groupes investissent beaucoup d'efforts pour développer ou utiliser des fonctions d'ondes conservant les symétries du problème [90, 93, 124, 144–146, 148, 149]. Cette tendance est sans surprise étant donné les avantages potentiels de cette approche. Il s'agit également de l'approche standard en chimie quantique. De plus, nous voyons surgir le développement de portes logiques quantiques respectant les symétries des modèles fermioniques comme la parité, le spin total et le nombre de particules [87, 96, 145, 149–151]. L'idée derrière ces portes est qu'elles conservent les symétries peu importe la valeur des paramètres associés. Par exemple, dans la conception de ses processeurs quantiques, l'équipe de Google a opté pour une approche symétrique en tant que porte à deux qubits native qu'ils appellent la porte de simulation fermionique (*fermionic simulation gate*) [152, 153]. Cette dernière peut nativement effectuer des interactions paramétrées du type $\hat{X}\hat{X} + \hat{Y}\hat{Y}$ et $\hat{Z}\hat{Z}$, qui sont courantes dans les problèmes fermioniques puisqu'elles conservent le nombre de particules.

Deuxièmement, pratiquement toutes les démonstrations de VQA pour le FHM ont utilisé l'état fondamental de la partie cinétique (\hat{T}) du Hamiltonien de Hubbard (2.7) comme état

initial au VQA. Il s'avère que ce choix implique un coût significatif en terme de profondeur de circuit et n'est donc pas réalisable à court terme sur les processeurs quantiques actuels. Effectivement, cet état requiert l'implémentation de la transformation de Fourier fermionique [91, 152, 154, 155], qui présente un circuit de portes compliqué et est aujourd'hui uniquement définie pour des systèmes périodiques. De plus, le fondamental de \hat{T} est parfois dégénéré et quel état ou quelle superposition de ces états propres mène à la meilleure convergence est généralement inconnu. Cet enjeu est d'ailleurs soulevé dans plusieurs études [144–146]. Mon projet sur QOCA se démarque de ces deux tendances, car il va à contre-courant en brisant volontairement les symétries du problèmes et en montrant que cette stratégie fonctionne bien même lorsque des états initiaux simples et faciles à préparer sont utilisés.

3.2 Article

L'idée originale d'incorporer des termes brisant les symétries du Hamiltonien a d'abord été proposée par David Poulin. Agustin Di Paolo et moi avons aussitôt compris cette approche dans le cadre du contrôle optimal quantique et l'avons appliqué à la construction de la forme variationnelle QOCA. J'ai appliqué QOCA au modèle de Fermi-Hubbard, puis à la molécule d'eau. J'ai également développé la forme variationnelle *short-QOCA* qui nous a permis de conclure que les circuits de QOCA peuvent être drastiquement raccourcis sans compromettre la performance. Alexandre Blais a offert une supervision étroite à Sherbrooke et des rencontres mensuelles étaient organisées avec nos collaborateurs chez IBM Research Zürich. Mes interactions avec ces derniers ont grandement augmenté lors de mon stage de trois mois dans leurs bureaux à la fin de ma maîtrise. David Sénéchal a offert un support inestimable quant à ce qui touche le modèle de Hubbard. J'ai rédigé l'article avec l'aide de tous les auteurs.

Quantum-optimal-control-inspired ansätze for variational quantum algorithms

Alexandre Choquette,^{1,2} Agustin Di Paolo,¹ Panagiotis Kl. Barkoutsos,²
David Sénéchal,¹ Ivano Tavernelli,² and Alexandre Blais^{1,3}

¹*Institut quantique & Département de physique, Université de Sherbrooke, Sherbrooke J1K 2R1 QC, Canada*

²*IBM Quantum, Zurich Research Laboratory, Säumerstrasse 4, 8803 Rüschlikon, Switzerland*

³*Canadian Institute for Advanced Research, Toronto, ON, Canada*

(Dated: July 29, 2020)

A central component of variational quantum algorithms (VQA) is the state-preparation circuit, also known as ansatz or variational form. This circuit is most commonly designed to respect the symmetries of the problem Hamiltonian and, in this way, constrain the variational search to a subspace of interest. Here, we show that this approach is not always advantageous by introducing ansätze that incorporate symmetry-breaking unitaries. This class of ansätze, that we call Quantum-Optimal-Control-inspired Ansätze (QOCA), is inspired by the theory of quantum optimal control and leads to an improved convergence of VQAs for some important problems. Indeed, we benchmark QOCA against popular ansätze applied to the Fermi-Hubbard model at half-filling and show that our variational circuits can approximate the ground state of this model with significantly higher accuracy and for larger systems. We also show how QOCA can be used to find the ground state of the water molecule and compare the performance of our ansatz against other common choices used for chemistry problems. This work constitutes a first step towards the development of a more general class of symmetry-breaking ansätze with applications to physics and chemistry problems.

The rise of noisy intermediate-scale quantum processors [1–3] requires us to find novel algorithms designed to attenuate the effects of noise. Variational quantum algorithms (VQA) are an example of such methods [4, 5]. These algorithms make use of a (noisy) quantum computer and a classical co-processor to minimize a cost function specified by a problem Hamiltonian \hat{H}_{prob} . This minimization is achieved by preparing a state that approximates the ground state of \hat{H}_{prob} on the quantum computer using an iterative procedure driven by the classical co-processor. Importantly, and thanks to the variational nature of these algorithms, this approach has been shown to potentially be resilient against noise, and well-suited to several applications including finance [6], pure mathematics [7], machine learning [8, 9], optimization problems [10, 11], quantum chemistry and materials [12–16], as well as quantum optics [17].

In VQAs, the state preparation requires the parameterization of a quantum circuit, referred to as the *ansatz* or *variational form*, that may or may not be structured around the problem. Recently, a considerable amount of effort has been invested in designing ansätze that preserve the symmetries of the problem Hamiltonian [18–23]. The goal of symmetry-preserving strategies is to constrain the variational search to a small vector space of interest, which in principle improves the probability of convergence to the target state with fewer optimizer iterations.

In this work, we highlight shortcomings of this approach. We then provide an ansatz that goes beyond symmetry-preserving methods by introducing a set of unitaries that break the symmetries of the problem Hamiltonian. To achieve this, we borrow ideas from the theory of quantum optimal control, where fast and high-fidelity operations are achieved through the addition of time-dependent symmetry-breaking terms to the

Hamiltonian. Focusing on fermionic systems, we incorporate such terms in a time-evolution-like ansatz [24] to obtain the Quantum-Optimal-Control-inspired Ansatz (QOCA). We benchmark this approach against common ansätze found in the literature for the Fermi-Hubbard model and apply these ideas to the water molecule with minimal modifications. We find that in most cases, this method produces approximations of the target ground state that are orders of magnitude more accurate. To understand this improvement, we show evidence that QOCA allows for an exploration in a slightly larger Hilbert space.

The paper is organized as follows: in Sect. I, we begin by presenting known approaches to the construction of the ansatz and then formally introduce QOCA and quantum optimal control theory in Sect. II. We also elaborate on our strategy for the selection of symmetry-breaking terms in Sect. II and explain how these can be incorporated into a variational ansatz for the Fermi-Hubbard model in Sect. III. Finally, we compare results obtained with the different approaches in Sect. IV.

I. VARIATIONAL ANSÄTZE

In the VQA framework, a quantum processor stores a quantum state $|\psi(\boldsymbol{\theta})\rangle$ parametrized by a collection of classical variational parameters $\boldsymbol{\theta}$. This state is prepared from a known and easily prepared reference state, $|\psi_0\rangle$, using a quantum circuit (the ansatz) $\hat{U}(\boldsymbol{\theta})$ such that $|\psi(\boldsymbol{\theta})\rangle = \hat{U}(\boldsymbol{\theta})|\psi_0\rangle$. The value of $\boldsymbol{\theta}$ is iteratively adjusted by a classical co-processor with the purpose of minimizing the cost function

$$E[\boldsymbol{\theta}] = \frac{\langle\psi(\boldsymbol{\theta})|\hat{H}_{\text{prob}}|\psi(\boldsymbol{\theta})\rangle}{\langle\psi(\boldsymbol{\theta})|\psi(\boldsymbol{\theta})\rangle}. \quad (1)$$

Numerous variational forms $\hat{U}(\boldsymbol{\theta})$ have been explored in the literature [19, 24–29]. Before introducing our approach, in this section we briefly review two widely used ansätze highlighting their advantages and disadvantages.

A. Hardware-efficient Ansatz

The Hardware-efficient Ansatz (HEA), introduced in Ref. [25], relies on gates that are native to the quantum hardware to produce circuits of high expressibility [30] and low depth. In particular, the HEA requires the application of successive blocks of parametrized single-qubit rotations followed by a generic entangling unitary $\hat{U}_{\text{Ent.}}$. An example for N qubits is

$$\hat{U}_{\text{HEA}}(\boldsymbol{\theta}) = \prod_d \hat{U}_{\text{Ent.}} \prod_{n=1}^N R_Z^{(n)}(\theta_{n,d}^Z) R_Y^{(n)}(\theta_{n,d}^Y), \quad (2)$$

where $\boldsymbol{\theta} = \{\theta_{n,d}^Z, \theta_{n,d}^Y\}$ collects all the variational parameters and $R_{\sigma_a}^{(n)}(\theta) = \exp[-i\theta\sigma_a/2]$ denotes a single-qubit rotation of angle θ around the $a \in \{x, y, z\}$ axis on qubit n . σ_a is the corresponding Pauli matrix. The parameter d is the number of layers, or *depth*, of the ansatz. Here and for the rest of this paper, we use the convention $\prod_i^N \hat{U}_i = \hat{U}_N \cdots \hat{U}_1$ for operator multiplication.

A feature of the HEA is that it is well suited to a broad exploration of the Hilbert space since it does not purposely favor a particular symmetry sector. This ansatz has already been experimentally implemented to prepare the ground state of small molecules [25], to simulate the folding of a few amino acid polymer [16], and to find the solution of classical optimization problems [11]. However, solving small instances of important problems does not provide a proof of scalability of the method for larger systems. Indeed, there is evidence that sufficiently random parametrized circuits, such as the ones produced by HEA, suffer from an exponentially vanishing gradient with the number of qubits making them more difficult to converge as the system size grows [31].

B. Variational Hamiltonian Ansatz

Ansätze that leverage the structure of the problem can avoid the aforementioned scalability issues since they do not explore the full exponentially large Hilbert space. Wecker *et al.* [24] introduced the Variational Hamiltonian Ansatz (VHA), which consists of a parametrized adaptation of the quantum circuit implementing time evolution under the problem Hamiltonian via Trotterization. In the VHA framework, the state-preparation unitary reads

$$\hat{U}_{\text{VHA}}(\boldsymbol{\theta}) = \prod_d \prod_j e^{i\theta_{j,d} \hat{H}_j}, \quad (3)$$

where $\boldsymbol{\theta} = \{\theta_{j,d}\}$ are the variational parameters and $\hat{H}_{\text{prob}} = \sum_j \hat{H}_j$ is the problem Hamiltonian expressed as the sum of non-commuting groups of terms

labeled \hat{H}_j . The depth d is associated with each time increment of the Trotterization of the time-evolution operator. If grouping the terms is done efficiently, this approach can be implemented using few variational parameters, therefore simplifying the classical optimization. However, depending on the complexity of the problem, circuits can be considerably longer as compared to those typically used with the HEA.

Fourier-transformed VHA (FT-VHA) To further reduce the number of variational parameters, it is possible to take advantage of the fact that most fermionic Hamiltonians can be written as $\hat{H}_{\text{prob}} = \hat{T} + \hat{V}$, where the diagonal bases of \hat{T} and \hat{V} are related through the fermionic Fourier transformation (FT) [32–34]. With the FT-VHA variational form, the FT is used to alternate between these bases at every Trotter step. In the context of quantum chemistry, this is known as the split-operator method [35, 36]. This idea was also recently introduced by Babbush *et al.* [37] for the variational quantum simulation of materials. The state-preparation unitary thereby reads

$$\hat{U}_{\text{FT-VHA}}(\boldsymbol{\tau}, \boldsymbol{\nu}) = \prod_d \text{FT}^\dagger \left(\prod_j e^{i\tau_{j,d} \hat{T}_j} \right) \text{FT} \left(\prod_j e^{i\nu_{j,d} \hat{V}_j} \right), \quad (4)$$

where $\boldsymbol{\tau} = \{\tau_{j,d}\}$ and $\boldsymbol{\nu} = \{\nu_{j,d}\}$ are the parameters associated with $\hat{T} = \sum_j \hat{T}_j = \text{FT} \hat{T} \text{FT}^\dagger$ and \hat{V} , respectively. Since now both \hat{T} and \hat{V} are diagonal, they only contain terms that commute and therefore the circuit decomposition of their exponentials can be achieved exactly, which was not the case of \hat{T} in the regular VHA. However, this comes at the cost of the long FT circuit [32, 34, 37].

Because they are built from the problem Hamiltonian, both VHA and FT-VHA respect the symmetries of the problem. For example, if no term of \hat{H}_{prob} allows the number of particles to change, this quantity will be conserved in the variational state $|\psi(\boldsymbol{\theta})\rangle$. This choice restricts the variational search to a relatively smaller subspace of the Hilbert space which, intuitively, can increase the performance of the VQA. Because of this, the VHA and FT-VHA ansätze are likely to perform better than HEA for large system sizes. However, as we show in Sect. IV, incorporating too much knowledge of the problem can also be detrimental.

Another popular approach in quantum chemistry is the UCCSD ansatz [4] which implements the exponential of a set of single- and double-excitation operators. Although not strictly Hamiltonian-based, this method preserves the parity symmetry of fermions and conserves the number of particles. Despite potentially providing accurate results, the UCCSD ansatz circuits can be very deep, limiting its applicability on near-term quantum devices.

II. QUANTUM-OPTIMAL-CONTROL-INSPIRED ANSATZ (QOCA)

To address the drawbacks of the ansätze discussed above, we propose an ansatz that borrows ideas from the theory of quantum optimal control [38–41], and which we therefore dub the Quantum-Optimal-Control-inspired Ansatz, or QOCA. The main idea behind QOCA resides in the introduction of carefully chosen symmetry-breaking unitaries into the symmetry-preserving ansatz VHA. In this section, we begin by reviewing some of the central aspects of the theory of quantum optimal control, and then show how these ideas can be incorporated in the design of variational forms.

A. Quantum optimal control

Quantum optimal control (QOC) theory describes the methods to optimally steer a quantum system from an initial state to a known final state [42]. Such techniques have been applied to a wide variety of problems including the quantum control of chemical reactions [43, 44], spins in nuclear magnetic resonance experiments [40, 45] and, more recently, to superconducting qubits [41, 46].

In this approach, the control Hamiltonian is specified by a set of time-independent drive Hamiltonians $\{\hat{H}_k\}$ whose amplitudes are parametrized by the time-dependent coefficients $\{c_k(t)\} \in \mathbb{R}$. The total Hamiltonian $\hat{H}(t)$ is then, in general, time-dependent such that

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \sum_k c_k(t) \hat{H}_k, \quad (5)$$

with \hat{H}_0 the free, or drift, Hamiltonian of the controlled system. Solving the Schrödinger equation of the driven system results in the unitary $\hat{U}(t)$, which can propagate pure states through time as $|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t)|\psi(0)\rangle$.

The system described by the Hamiltonian of Eq. (5), defined in a Hilbert space of dimension n , is said to be controllable if $\hat{U}(t)$ can be any matrix of $SU(n)$. In other words, the system is controllable if for any initial state $|\psi(0)\rangle$, there exists a set controls $\{c_k(t)\}$ and a time $T > 0$ for which the state $|\psi(T)\rangle$ can be any target state of the Hilbert space [42].

Quantum optimal control techniques, such as the GRAPE algorithm [40], provide a method for designing the control pulses $c_k(t)$ to achieve a desired state preparation. This is usually realized by seeking the set of controls and time T that optimize a cost function characterizing the state-preparation fidelity, which may include constraints such as the control time and the maximum pulse amplitudes.

In the GRAPE algorithm, time is discretized into N increments, or pixels, of duration Δt such that the total evolution occurs in a time $T = N\Delta t$. Using this

discretization, the continuous control fields $c_k(t)$ are now parametrized by the new constant piecewise control fields $\mathbf{u}_k = \{u_{k,j}\}$ as

$$c_k(t) = \sum_{j=0}^{N-1} u_{k,j} \Pi_j(t, \Delta t), \quad (6)$$

where $\Pi_j(t, \Delta t) \equiv \Theta(t - j\Delta t) - \Theta(t - (j+1)\Delta t)$ with Θ the Heaviside function. The time evolution operator for a time T therefore reads

$$\hat{U}(T) = \prod_{j=0}^{N-1} \exp \left[-i\Delta t \left(\hat{H}_0 + \sum_k u_{k,j} \hat{H}_k \right) \right], \quad (7)$$

and optimality is achieved by iteratively tuning the values of the discrete control fields $\{u_{k,j}\}$. Because this time propagator incorporates drive terms $\{\hat{H}_k\}$, that typically do not commute with the drift Hamiltonian, $\hat{U}(T)$ may implement unitary operations that are distinct from that generated by the drift Hamiltonian alone. In standard QOC problems, fast and efficient optimization of the control fields is possible because the target state (or operation) is known. This is, however, not the case in the context of VQA. Adapting these techniques to the VQA setting therefore requires to eliminate any information about the target state from the QOC cost function, therefore making the optimization less straightforward.

B. The QOCA variational form

Building on the concept of quantum optimal control, we modify the VHA by constructing a variational form which includes a set of *drive* terms $\{\hat{H}_k\}$ in addition to the problem Hamiltonian \hat{H}_{prob} . QOCA therefore mimics time evolution under the new Hamiltonian

$$\hat{H}_{\text{QOCA}}(t) = \hat{H}_{\text{prob}} + \sum_k c_k(t) \hat{H}_k, \quad (8)$$

where, by design, $[\hat{H}_{\text{prob}}, \hat{H}_k] \neq 0 \forall k$. We then construct the state-preparation circuit for QOCA by parameterizing the time-evolution-like operator

$$\hat{U}_{\text{QOCA}}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\delta}) = \prod_d \left(\prod_j e^{i\theta_{j,d} \hat{H}_j} \prod_k e^{i\delta_{k,d} \hat{H}_k} \right), \quad (9)$$

where $\hat{H}_{\text{prob}} = \sum_j \hat{H}_j$ and $\boldsymbol{\theta} = \{\theta_{j,d}\}$ are the problem Hamiltonian parameters. Similar to Eq. (6), $\boldsymbol{\delta} = \{\delta_{k,d}\}$ are the discrete drive amplitudes of the control fields $c_k(t)$ of Eq. (8) which we use as variational parameters. Again, d is the depth of the ansatz and is analog to the steps in the time evolution.

A key concept of QOCA is that the problem Hamiltonian part helps constraining the variational search to the relevant symmetry sector of the Hilbert space, while

the *drive* part allows the ansatz to take shortcuts by temporarily exiting this sector. This concept is schematically drawn on Fig. 1b where we illustrate possible paths in the Hilbert space for the HEA, VHA and QOCA variational forms.

In principle, one has the freedom to select any drive Hamiltonians that do not commute with \hat{H}_{prob} . However, it is not straightforward to predict which choice will have the most positive impact on the outcome of the VQA. One option is to use an adaptive approach such as the one described in Refs. [47, 48]. However, in the next section we show how simple considerations can help to bound the number of interesting drive operators, and suggest which of these could be more effective.

C. Which drive Hamiltonians are useful for fermions?

With the objective of applying QOCA to the Fermi-Hubbard model, we consider the time-dependent fermionic Hamiltonian

$$\begin{aligned} \hat{H}_f(t) = & \sum_j (\alpha_j(t) \hat{a}_j + \alpha_j^*(t) \hat{a}_j^\dagger) \\ & + \sum_{i,j} \beta_{ij}(t) (\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j + \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i) + \sum_{i,j} \gamma_{ij}(t) \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j, \end{aligned} \quad (10)$$

where \hat{a}_j^\dagger and \hat{a}_j are fermionic ladder operators of spin-orbital j respecting the anti-commutation relations $\{\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger\} = \delta_{ij}$ and $\{\hat{a}_i, \hat{a}_j\} = \{\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger\} = 0$. Importantly, $\hat{H}_f(t)$ is controllable in the sense that any unitary matrix can be generated by solving its Schrödinger equation [49, 50].

We note that while the first term of $\hat{H}_f(t)$ is unphysical since it breaks the parity symmetry of fermions, the quadratic and quartic terms occur in many physical models. This makes $\hat{H}_f(t)$ attractive for designing driven physically inspired ansätze as we are guaranteed that drive terms of form $\alpha(t) \hat{a} + \alpha^*(t) \hat{a}^\dagger$ will not commute with the physical problem Hamiltonian. Interestingly, the use of such terms has been proposed in the context of variational error suppression [5] as they may allow a variational state to re-enter a particular symmetry sector to correct for the effect of symmetry-breaking errors.

In the QOCA variational form, we propose to first write $\hat{H}_f(t)$ keeping only the quadratic and quartic terms that also appear in \hat{H}_{prob} , along with few additional symmetry-breaking drive terms. As in Eq. (9), we then parametrize the resulting time-evolution-like operator using the associated $\alpha(t)$, $\beta(t)$, and $\gamma(t)$ coefficient as parameters. With these choices, the QOCA variational form generates circuits that are only slightly different from those generated by the problem Hamiltonian.

We also note that the principles of this analysis can be extended to the simulation of non-fermionic Hamiltonians, provided a controllable Hamiltonian for these systems.

III. QOCA FOR THE FERMİ-HUBBARD MODEL

For completeness, we start this section by reviewing the Fermi-Hubbard model and explain how we use the QOCA variational form to prepare its ground state. We motivate our choice of initial state, and elaborate on the selection and circuit decomposition of the drive terms. Finally, we introduce short-QOCA, a variant of QOCA that yields shorter circuits by dropping some terms of \hat{H}_{prob} from the Hamiltonian that generates the regular QOCA ansatz.

A. The Fermi-Hubbard model (FHM)

The Fermi-Hubbard model is an iconic model in the study of strongly correlated materials [51]. It describes interacting spin- $\frac{1}{2}$ fermions on a lattice where each site can be occupied by up to two particles of opposite spins. The Hamiltonian of the FHM for L lattice sites takes the form

$$\hat{H}_{\text{FHM}} = \underbrace{-t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} \hat{a}_{i\sigma}^\dagger \hat{a}_{j\sigma}}_{\equiv \hat{T}} + \underbrace{U \sum_{i=1}^L \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} - \mu \sum_{i,\sigma} \hat{n}_{i\sigma}}_{\equiv \hat{V}}, \quad (11)$$

where i, j are the lattice-site indices, and $\sigma = \{\uparrow, \downarrow\}$ labels the spin degree of freedom. In the first term, $\langle i, j \rangle$ denotes a sum over nearest-neighbor sites, and $\hat{n}_{i\sigma} = \hat{a}_{i\sigma}^\dagger \hat{a}_{i\sigma}$ is the occupation operator of the spin-orbital labeled $i\sigma$.

The first term of Eq. (11) represents hopping between neighboring sites with amplitude $-t$ and will generally be referred to as \hat{T} . This term is diagonal in momentum space if periodic boundary conditions are used, and its ground state consists of delocalized plane waves. The second term is a non-linear, on-site Coulomb repulsion of strength U , while the last term is the chemical potential. These last two terms are diagonal in the position basis and, taken together, are denoted \hat{V} . The ground state of \hat{V} is described by wave functions localized on the sites.

A particularly interesting instance of the FHM is the half-filling regime (which occurs for $\mu = U/2$) at intermediate coupling, $U/t \sim 4$. In this regime, both \hat{T} and \hat{V} contribute significantly to the system's energy, thus creating competition between the localized and delocalized states of the electrons, leading to rich physics such as the Mott transition. Because it becomes impossible to accurately treat either part of the Hamiltonian perturbatively, numerical exact diagonalization of the FHM is difficult beyond 24 lattice sites at half-filling [52]. As we seek to benchmark the usefulness of our variational form for all cases, we work in this particularly challenging regime.

Despite its apparent simplicity, this model has been used to study systems ranging from heavy fermions [53] to high-temperature superconductors [54, 55]. As a result, it is an interesting problem to benchmark near-term

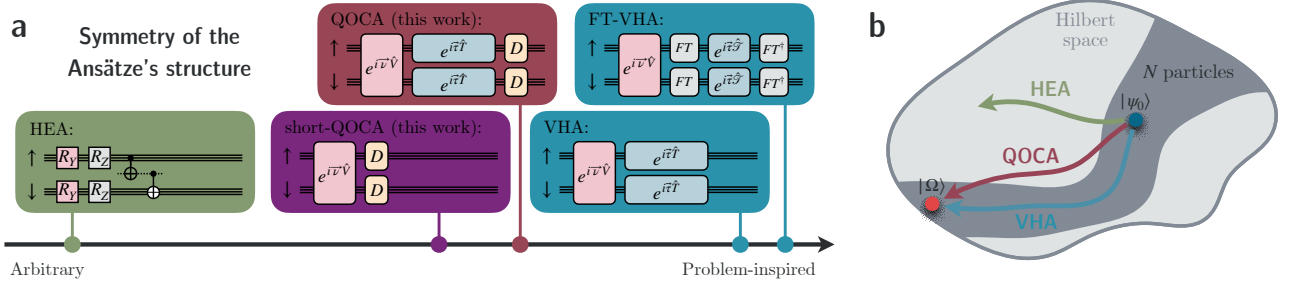


FIG. 1. **a** Single circuit layer of the ansätze studied in this work arranged by the symmetry of their structure. A high symmetry means that the ansatz is completely built around the problem Hamiltonian while a low one reflects the arbitrariness of its circuit. We show the hardware-efficient Ansatz (HEA) Eq. (2), the variational Hamiltonian Ansatz (VHA) Eq. (3), the Fourier-transformed VHA (FT-VHA) Eq. (4), the Quantum-Optimal-Control-inspired Ansatz (QOCA) Eq. (9) along with a shallower version of QOCA, the short-QOCA ansatz Eq. (18). The horizontal lines represent the qubit registers that encode the spin orbitals associated with the \uparrow or \downarrow spins. For HEA, the entangling block is a ladder of CNOT similar to the ones in the *Notation* box of Figure 2. For all other ansätze, \hat{T} and \hat{V} are respectively the kinetic and interaction parts of the problem Hamiltonian and $\{\tau, \nu\}$ are their associated variational parameters. For FT-VHA, we have that $\hat{T} = \text{FT} \hat{T} \text{FT}^\dagger$. The drive circuit D is defined in Eq. (17) and illustrated in Figure 2. **b** Possible paths in the Hilbert space for the HEA, VHA and QOCA variational forms. The initial state $|\psi_0\rangle$ and the target state $|\Omega\rangle$ are in the same symmetry sector containing N particles. Since HEA does not conserve the symmetries of \hat{H} , its path easily escapes from the fixed particle number subspace, while VHA is restricted to it. By introducing symmetry-breaking terms, QOCA has the ability to escape slightly from the N particles subspace to find shortcuts in Hilbert space.

quantum computers [56], and a useful performance test for variational ansätze. For these reasons, variational quantum algorithms have already been used to find the ground state of the FHM, for example using the HEA variational form [57], the VHA [22–24, 58, 59], and other symmetry-preserving ansätze [22, 26, 56, 60, 61].

B. Encoding and parametrization of the ansätze

We use the Jordan-Wigner (JW) transformation to encode fermionic Fock states into qubits registers, as detailed in Appendix A. Moreover, we work in real space and order the basis vectors for the $2L$ spin orbitals as $|f_{1\uparrow} \dots f_{L\uparrow}; f_{1\downarrow} \dots f_{L\downarrow}\rangle$ with $f_p \in \{0, 1\}$ the occupation of orbital p .

Using this purely conventional choice, in Fig. 1a we schematically draw one layer of the circuits implementing the different ansätze discussed above and arranged by the symmetry of their structure. A highly symmetric ansatz is completely built around \hat{H}_{prob} while a weakly symmetric construction is arbitrary with respect to the problem.

To parametrize these circuits, we consider two possible strategies: one corresponding to full parametrization of the single- and two-qubit gates and the other having a number of parameters that only grows with the depth of the ansatz, but not with the number of qubits. Whenever used, the latter is specified with the label ‘scalable’. Both strategies are elaborated on in Appendix B and details of the numerical simulation are presented in Appendix C.

C. Initial state

In general, the performance of VQAs strongly depends on the choice of initial state and variational parameters. The initial state acts as an educated guess to the target state and is often chosen such as to be easily computable classically. Moreover, because the initialization stage of a variational algorithm should be straightforward or otherwise be treated as a separate routine [62], we are interested in benchmarking the performance of the QOCA variational form for the simple initial state

$$|\psi_0\rangle = H^{\otimes N} |0\rangle = |+\rangle^{\otimes N}, \quad (12)$$

where H is the Hadamard gate. In addition to being easy to prepare, this initial state corresponds to half-filling and zero total spin, placing it in the same symmetry sector as the target state.

While this choice allows us to demonstrate the usefulness of the QOCA variational form given unstructured, simple initial conditions, we also show how the convergence can be improved further by using the ground state of the non-interacting FHM fixing $U = \mu = 0$ in Eq. (11) as initial state. More details on how to prepare this more complex state are provided in Appendix D.

D. Drive Hamiltonians

With the goal of reducing the number of variational parameters, we fix $\alpha_j(t)$ to 1 and i in Eq. (10) leading to

$$\hat{H}_1 = \sum_{j=1}^L (\hat{a}_j^\dagger + \hat{a}_j), \quad (13)$$

$$\hat{H}_2 = \sum_{j=1}^L i(\hat{a}_j^\dagger - \hat{a}_j). \quad (14)$$

We moreover obtain the drive equations for a spinless system and independently apply the resulting circuit to the two subspaces corresponding to the spin projections up and down for all sites. Performing the JW transformation on Eqs. (13) and (14), we find

$$\hat{H}_1 \mapsto \sum_{j=1}^L \hat{X}_j \bigotimes_{l < j} \hat{Z}_l, \quad (15)$$

$$\hat{H}_2 \mapsto \sum_{j=1}^L \hat{Y}_j \bigotimes_{l < j} \hat{Z}_l, \quad (16)$$

where \hat{X} , \hat{Y} and \hat{Z} are Pauli matrices. To incorporate these expressions into the QOCA variational form Eq. (9), we perform a first-order Trotter-Suzuki decomposition, arriving at the circuit equation for the d th layer of the ansatz,

$$\begin{aligned} & \prod_{k=1,2} e^{i\delta_{k,d} \hat{H}_k} \\ & \approx \prod_{j=1}^L \exp \left[i\delta_{1,d} \hat{X}_j \bigotimes_{l < j} \hat{Z}_l \right] \exp \left[i\delta_{2,d} \hat{Y}_j \bigotimes_{l < j} \hat{Z}_l \right], \end{aligned} \quad (17)$$

where $\{\delta_{k,d}\}$ are the variational parameters associated with the k th drive term of that layer. A schematic of the circuit implementing Eq. (17) for 4 qubits is illustrated in Fig. 2 where we also show a compiled version in terms of CNOTs.

E. The short-QOCA variational form

One drawback of QOCA is that, depending on the form of the drive, the corresponding quantum circuits can be long. Here we demonstrate a practical approach for the reduction of the circuit depth without compromising the performance.

Because the drive D in Fig. 2 and the kinetic part of the FHM Eq. (11) are both block-diagonal in the spin degree of freedom, we chose to remove the latter term, which is also costly in terms of two-qubit gates, arriving to the simplified form of the ansatz

$$\hat{U}_{\text{sqOCA}}(\boldsymbol{\nu}, \boldsymbol{\delta}) = \prod_d \left(\prod_j e^{i\nu_{j,d} \hat{V}_j} \prod_k e^{i\delta_{k,d} \hat{H}_k} \right), \quad (18)$$

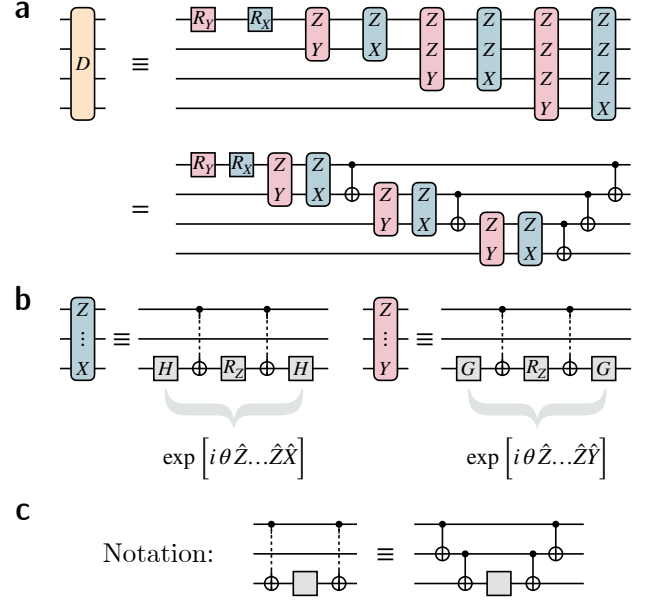


FIG. 2. **a** Circuit decomposition of the drive Eq. (17) used for QOCA. This circuit generalizes to any number of qubits by appending more $\hat{Z} \dots \hat{Z} \hat{Y}$ and $\hat{Z} \dots \hat{Z} \hat{X}$ multi-qubit gates at the end. We also show the circuit compiled to one- and two-qubit (CNOT) gates. **b** shows a decomposition of the multi-qubit gates based on a conventional approach to decompose exponentials of Pauli strings into circuits of CNOTs described in [63]. The transformation $H = (\hat{X} + \hat{Z})/\sqrt{2}$ is the Hadamard gate which changes between the \hat{X} and \hat{Z} bases and $G = (\hat{Y} + \hat{Z})/\sqrt{2}$ is the equivalent transformation between the \hat{Y} and \hat{Z} bases. The angles of the rotations $R_a(\theta) = \exp[-i\theta \hat{\sigma}_a/2]$ are the variational parameters, where $\hat{\sigma}_a$ is a Pauli matrix. **c** shows the notation shortcut used for the ladders of CNOTs.

where $\hat{V} = \sum_j \hat{V}_j$ is the on-site interaction part of the Fermi-Hubbard Hamiltonian Eq. (11) and $\boldsymbol{\nu} = \{\nu_{j,d}\}$ are the associated variational parameters. We refer to this simplified version of the QOCA variational form as *short-QOCA*, see Fig. 1.

IV. NUMERICAL RESULTS

In this section, we compare results obtained from numerical simulations of QOCA and short-QOCA for the Fermi-Hubbard model, and contrast these results with those obtained with the other ansätze discussed in this article. As an illustration of the use of QOCA beyond the Fermi-Hubbard model, we also present a comparison of the performance of this ansatz over a hardware-efficient approach and the UCCSD ansatz for a 12-qubit representation of the H_2O molecule.

Throughout this section, we use the fidelity with respect to the target state $|\Omega\rangle$ (i.e. ground state of the FHM or of the water molecule) as defined by

$$\text{Fidelity} = |\langle \psi(\boldsymbol{\theta}) | \Omega \rangle|^2, \quad (19)$$

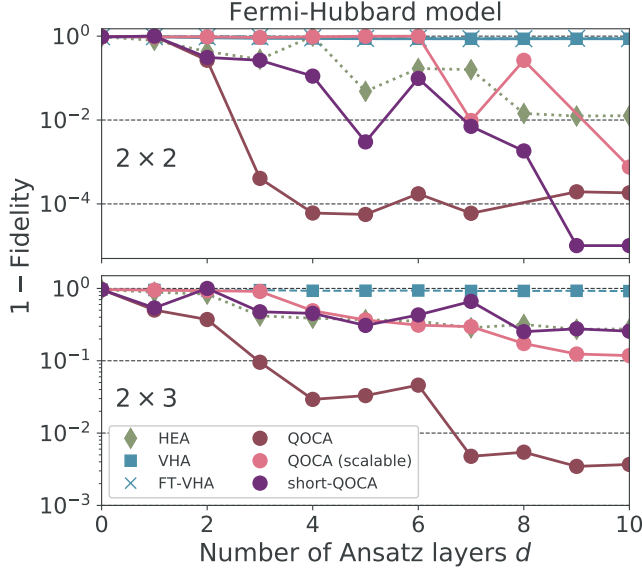


FIG. 3. Final variational state infidelities with respect to the target state as a function of the number of layers d of the variational forms of this work. Top panel is for a 2×2 plaquette while the bottom panel is a 2×3 system without periodic boundary conditions. The initial state is $|+\rangle^{\otimes N}$ for all cases. Data at $d = 0$ corresponds to the initial state alone, which has a fidelity of 0.035 with the target state. Unless specified, all ansätze are fully parametrized according to Appendix B 1.

to quantify the quality of the variational state $|\psi(\theta)\rangle$.

A. Fermi-Hubbard model

We consider 2×2 (8 qubits) and 2×3 (12 qubits) lattices of the Fermi-Hubbard model at half-filling with open boundary conditions. We note that the former configuration can also be seen as a periodic 1×4 chain. This allows us to compare with the FT-VHA variational form, as the fermionic Fourier transform on which this approach relies is defined for periodic boundary conditions. Importantly, we find that for smaller systems such as the four-qubits 2×1 dimer, all ansätze converge in a few tens of iterations on the ground-state energy with a precision of $< 10^{-7}$ using a single ansatz layer, $d = 1$, except for the HEA which requires two layers.

a. Comparing the ansätze For systems with four and six fermionic sites, we observe important variations in the ability of the different ansätze to converge to the ground state energy. This is illustrated in Fig. 3 which shows, for all ansätze, the final state infidelity as a function of the number of ansatz layers, d , initialized with the simple half-filled state of Eq. (12). The maximum fidelities achieved for all ansätze are reported in Table I along with resource counts using a circuit compilation in terms of CNOTs.

We first note that VHA and FT-VHA perform poorly for both system sizes and that their performance does

TABLE I. Maximum fidelities with respect to the ground state of the FHM, attained for d ansatz layers, each requiring a number n_θ/d of variational parameters and n_{CX}/d CNOTs per layer. The latter estimate assumes an all-to-all connectivity and the same compiling procedure is used for all ansätze.

	Hubbard model	Max Fid.	d	n_θ/d	n_{CX}/d
2×2 (8 qubits)	HEA	0.9876	9	16	7
	VHA	0.1343	8	8	56
	FT-VHA	0.1315	7	8	120
	QOCA	0.9999	4	16	88
	QOCA (scalable)	0.9992	10	5	88
	short-QOCA	0.9999	9	12	40
2×3 (12 qubits)	HEA	0.7276	10	24	11
	VHA	0.0804	10	13	116
	QOCA	0.9965	9	25	172
	QOCA (scalable)	0.8822	10	6	172
	short-QOCA	0.7476	8	18	68

not improve with the addition of more entangling layers, *i.e.* increasing d . Because these ansätze are particle-number conserving, this observation suggests that VHA and FT-VHA may not efficiently search over all states of fixed particle number in the variational landscape, as was originally proposed. Moreover, since FT-VHA performs similarly to VHA for the 2×2 system, we also conclude that alternating bases with the fermionic Fourier transform does not yield superior results for these lattice sizes.

Interestingly, QOCA systematically reaches the ground state of the Fermi-Hubbard model with significantly more accuracy than VHA for both system sizes, indicating that the additional symmetry-breaking terms help the convergence. This advantage persists even when drastically reducing the number of variational parameters from 16 to 5 per layer in the case of the scalable parametrization of QOCA, which converged with 0.9992 fidelity at $d = 10$ for the 2×2 system. The hardware-efficient approach also performs better than VHA, although it uses considerably more parameters than all other ansätze given it generally requires more layers to achieve similar performances. It is unclear how one might reduce that number to a favorable scaling.

Data obtained with the short-QOCA variational form show that the QOCA circuits can be substantially shortened by removing more than half of the two-qubit gates at every step without much compromise on the performance for small systems. In fact, for the 2×2 Hubbard model, a fidelity of 0.9999 is achieved with 9 layers of this ansatz.

With improved fidelities for shallower circuits which use fewer variational parameters than standard approaches, we find that QOCA provides significant gain with respect to other common ansätze.

b. The benefits of breaking symmetries Figure 4 shows the evolution of the average number of particles per lattice site (top panel) and the infidelity of the variational state with respect to the target state (bottom

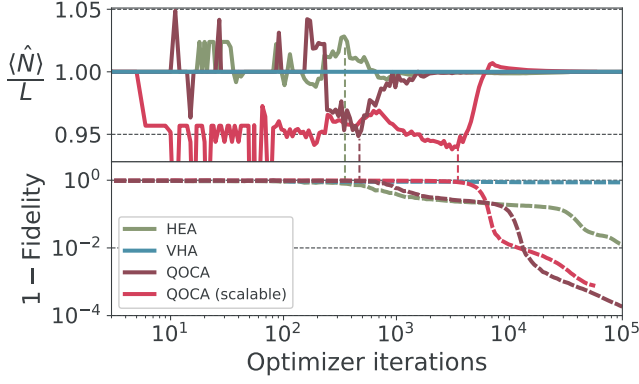


FIG. 4. Top: Average number of particles per lattice site in the variational state at every iteration of the VQA routine. $\langle \hat{N} \rangle = \sum_{i,\sigma} \langle \hat{n}_{i\sigma} \rangle$ is the total occupation and L is the number of sites. Bottom: corresponding variational state infidelity, $1 - |\langle \psi(\theta) | \Omega \rangle|^2$, with respect to the ground state of the Fermi-Hubbard model $|\Omega\rangle$. The results are for a 2×2 system and the initial state is $|+\rangle^{\otimes N}$ for all ansätze. Runs for ansatz depth $d = 9$ was used for HEA and $d = 10$ for the others, but this behavior is observed for most d .

panel) throughout the optimization process for the same simulations as in Fig. 3.

Focusing first on the top panel we first note that, because the initial state $|+\rangle^{\otimes N}$ is half-filled, all variational states begin in the correct particle-number symmetry sector of the Hilbert space with $\langle \hat{N} \rangle / L = 1$. Because VHA does not contain terms that allow the particle number to change, this quantity is observed to be constant throughout the optimization. We hypothesize that the poor performance of this ansatz in reaching the ground state is caused by the inability of this variational form to overcome local minima in parameter space.

In contrast, with their particle-non-conserving drive terms, both parametrizations of QOCA allow the average site occupancy to deviate from $\langle \hat{N} \rangle / L = 1$ as the drive angles are being tuned away from zero by the optimizer. As seen in Fig. 4, this can lead to the sharp features observed in the first few $\sim 10^2$ iterations as the classical optimizer can initially overweight the value of individual terms. Over the full optimization, the number of particles deviates only slightly from the target value $\langle \hat{N} \rangle / L = 1$ with changes of only $\sim 5\%$ of the site occupancy. This is an indication that the symmetry-breaking terms in QOCA allow the ansatz to explore a Hilbert space that is slightly larger than the manifold of fixed particle number. Nevertheless, we find that these relatively small excursions out of the target symmetry sector can significantly ease convergence of the VQA. Indeed, we observe that the onset of the return to the target symmetry sector, as indicated by the vertical dashed lines in Fig. 4 is often associated with the abrupt descents in the infidelity, which may indicate that regions of steep gradients in parameter space are found.

This behavior is also observed for the hardware-

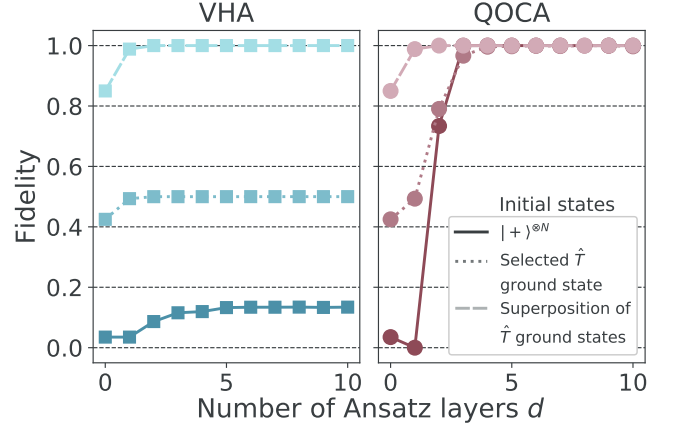


FIG. 5. Variational state fidelities with respect to the ground state of the 2×2 FHM as a function of the number of ansatz layers, d , for the VHA and QOCA variational forms. Results with three initial states are presented: (solid) Hadamard gates on every qubit $|+\rangle^{\otimes N}$, (dotted) a selected ground state of \hat{T} corresponding to $|\Omega_T^{(1)}\rangle$ of Appendix D, and (dashed) a superposition of ground states of \hat{T} corresponding to $|\Omega_T\rangle$ of Appendix D.

efficient ansatz of Eq. (2) which also, does not preserve the symmetries of \hat{H}_{prob} . This phenomenon is not particular to the realizations displayed in the figure, and it is also observed for other system sizes and initial states.

We note, however, that these desired regions in parameter space would never be found if an error-mitigation technique based on symmetry verification were employed [64, 65]. Indeed, in these schemes the variational states are post-selected after the energy measurements only if they conserve desired symmetries of the target state. However, other strategies for error mitigation remain applicable [66–68].

c. Initial state Because it provides a simple setting to benchmark the performance of the different ansätze, we have so far considered only the single easily-prepared initial state of Eq. (12). Improved approximation to the ground state can, however, be obtained if a more structured initial state is considered although at the price of more complex state preparation circuits.

In Fig. 5, we compare the performance of the VHA and QOCA variational forms on the 2×2 lattice with the following initial states of increasing complexity: i) the simple state $|+\rangle^{\otimes N}$, ii) one of the degenerate ground states of \hat{T} labelled $|\Omega_T^{(1)}\rangle$ in Appendix D, and iii) the superposition of ground states of \hat{T} labelled $|\Omega_T\rangle$ of Appendix D.

While the final variational state obtained with VHA strongly depends on the initial state, QOCA systematically achieves convergence with fidelity > 0.9999 , regardless of the initialization choice. Again because of its ability to move between symmetry sectors, these results illustrate QOCA’s robustness to simple, unstructured, initial conditions that can have very small overlaps with the tar-

TABLE II. Maximum fidelities obtained with d entangling layers, n_θ/d variational parameters and n_{CX}/d CNOTs per layer and different initial states for the QOCA, HEA and UCCSD variational forms applied to the water molecule. The initial states are either the Hartree-Fock (HF) approximation to the ground state or the equal superposition of all basis states $|+\rangle^{\otimes N}$. Again, the gate count estimate assumes an all-to-all connectivity and the same compiling procedure is used for all ansätze.

Water molecule (12 qubits)					
	Initial state	Max Fid.	d	n_θ/d	n_{CX}/d
QOCA	$ +\rangle^{\otimes N}$	0.9742	1	23	108
	$ +\rangle^{\otimes N}$	0.9931	5	23	108
	HF	0.9735	1	23	108
	HF	0.9917	7	23	108
HEA	$ +\rangle^{\otimes N}$	0.9820	8	24	11
UCCSD	HF	0.9748	1	8	528

get ground state. For the two variational forms, using a superposition of the degenerate ground states of \hat{T} as initial state (dashed lines) leads to convergence with fewer entangling layers. This, however, comes at the cost of significantly increasing the complexity of the initialization stage of the VQA (see Appendix D).

B. Proof-of-principle implementation of the H₂O molecule

The previous section illustrates how QOCA can approximate the ground state of the FHM with systematically more accuracy than other ansätze even when faced with unstructured initial conditions. In order to investigate the broader applicability of this method, we now benchmark the QOCA variational form on a quantum chemistry problem. As a proof-of-principle test, we consider the H₂O molecule in its equilibrium configuration. Because we freeze the core orbitals, this problem maps to 12 qubits using the STO3G basis set. The Hamiltonian is obtained using the PySCF driver as provided in Qiskit Chemistry [69]. We compare the performance of QOCA against HEA together with the well-known chemistry-inspired UCCSD ansatz [4]. Because the Hamiltonian describing the water molecule has significantly more terms than the FHM, directly implementing Hamiltonian-based ansätze as it is done above would lead to very long circuits. Therefore, we do not consider VHA for this problem.

In consequence, as a simple implementation of QOCA to a quantum chemistry problem, we use a variation of the ansatz based on the 12-qubit Hamiltonian of an open 1×6 Fermi-Hubbard chain with the drive terms of Eqs. (13) and (14). Although the water molecule Hamiltonian describes a richer set of fermionic interactions than the FHM, this choice of ansatz offers one of the simplest construction that simulates electron-electron correlations and is therefore a good starting point. More-

over, the ansatz is fully parametrized as before and the simulations were achieved under the same numerical conditions.

The maximum fidelities achieved for the QOCA, HEA and UCCSD variational forms are reported in Table II for different number of ansatz layers d and initial states, which are either the Hartree-Fock (HF) approximation to the ground state or the equal superposition of all basis states $|+\rangle^{\otimes N}$. Both initial states require one layer of single-qubit gates to prepare. The number of variational parameters (n_θ/d) and CNOT gates (n_{CX}/d) per layer are also presented. For the case of UCCSD we use $d = 1$, as it is proven to be enough for the simulation of chemical systems [27, 70]. For this reason, UCCSD uses significantly fewer parameters than other approaches, however, the resulting circuit requires roughly the same two-qubit-gate count as a $d = 5$ QOCA circuit.

We observe that a single layer ($d = 1$) QOCA circuit can prepare the ground state of the water molecule with fidelity 0.9742, a performance which is comparable to that of the well-established UCCSD ansatz (0.9748). However, while this does not improve the performance of UCCSD, adding layers up to $d = 5$ for QOCA increased the fidelity to 0.9931. Interestingly, the $|+\rangle^{\otimes N}$ initial state, which has a 9.95×10^{-5} overlap with the target state, yields better results for QOCA with fewer ansatz layers than the Hartree-Fock initial state, which has a 0.9735 overlap. These simulations suggest that QOCA can be useful also for quantum-chemistry problems. Modifying the QOCA circuit to better reproduce the interactions between the spin orbitals of the water molecule could lead to further improvements in performance.

V. CONCLUSION

We introduced the Quantum-Optimal-Control-inspired Ansatz by adding carefully chosen symmetry-breaking drive terms to the problem Hamiltonian and parametrizing the resulting time-evolution-like operator. We first applied QOCA to the half-filled Fermi-Hubbard model and found that in most cases it yields to a faster and more accurate convergence than standard approaches, even with unstructured initial states having little overlap with the target ground state. We showed evidence that this improved convergence is made possible by the symmetry-breaking terms allowing for small excursions outside of the target symmetry sector of the problem Hamiltonian. Moreover, we used QOCA to prepare the ground state of the water molecule, and showed that it can surpass the commonly used UCCSD ansatz with drastically shorter circuits.

Its broader applicability and the flexibility in choosing drive terms make QOCA a promising approach to tackle a wide range of quantum chemistry and materials problems on near-term quantum computers. Although the QOCA circuits are currently too deep to be imple-

mented reliably on today’s quantum devices, we expect that it may exhibit some resilience to symmetry-breaking errors. Our work represents a first step towards the development of a more general class of symmetry-breaking ansätze for variational quantum algorithms.

ACKNOWLEDGMENTS

We thank David Poulin, Jonathan Gross and Alexandre Daoust for useful discussions. This work was un-

dertaken thanks in part to funding from NSERC, the Canada First Research Excellence Fund and the U.S. Army Research Office Grant No. W911NF-18-1-0411.

Note added After completion of this work, we became aware of related work that was recently posted [71].

-
- [1] J. Preskill, Quantum computing in the nisq era and beyond, *Quantum* **2**, 79 (2018).
 - [2] F. Arute, K. Arya, R. Babbush, D. Bacon, J. C. Bardin, R. Barends, R. Biswas, S. Boixo, F. G. Brandao, D. A. Buell, *et al.*, Quantum supremacy using a programmable superconducting processor, *Nature* **574**, 505 (2019).
 - [3] K. Wright, K. Beck, S. Debnath, J. Amini, Y. Nam, N. Grzesiak, J.-S. Chen, N. Pienti, M. Chmielewski, C. Collins, *et al.*, Benchmarking an 11-qubit quantum computer, *Nature Communications* **10**, 1 (2019).
 - [4] A. Peruzzo, J. McClean, P. Shadbolt, M.-H. Yung, X.-Q. Zhou, P. J. Love, A. Aspuru-Guzik, and J. L. O’Brien, A variational eigenvalue solver on a photonic quantum processor, *Nature communications* **5**, 4213 (2014).
 - [5] J. R. McClean, J. Romero, R. Babbush, and A. Aspuru-Guzik, The theory of variational hybrid quantum-classical algorithms, *New Journal of Physics* **18**, 023023 (2016).
 - [6] C. Zoufal, A. Lucchi, and S. Woerner, Quantum generative adversarial networks for learning and loading random distributions, *arXiv preprint arXiv:1904.00043* (2019).
 - [7] C. Bravo-Prieto, R. LaRose, M. Cerezo, Y. Subasi, L. Cincio, and P. J. Coles, Variational quantum linear solver: A hybrid algorithm for linear systems, *arXiv preprint arXiv:1909.05820* (2019).
 - [8] M. Schuld and N. Killoran, Quantum machine learning in feature hilbert spaces, *Physical review letters* **122**, 040504 (2019).
 - [9] V. Havlíček, A. D. Córcoles, K. Temme, A. W. Harrow, A. Kandala, J. M. Chow, and J. M. Gambetta, Supervised learning with quantum-enhanced feature spaces, *Nature* **567**, 209 (2019).
 - [10] E. Farhi, J. Goldstone, and S. Gutmann, A quantum approximate optimization algorithm, *arXiv preprint arXiv:1411.4028* (2014).
 - [11] P. K. Barkoutsos, G. Nannicini, A. Robert, I. Tavernelli, and S. Woerner, Improving variational quantum optimization using cvar, *Quantum* **4**, 256 (2020).
 - [12] M. Reiher, N. Wiebe, K. M. Svore, D. Wecker, and M. Troyer, Elucidating reaction mechanisms on quantum computers, *Proceedings of the National Academy of Sciences* **114**, 7555 (2017).
 - [13] D. Wecker, M. B. Hastings, N. Wiebe, B. K. Clark, C. Nayak, and M. Troyer, Solving strongly correlated electron models on a quantum computer, *Physical Review A* **92**, 062318 (2015).
 - [14] J. Olson, Y. Cao, J. Romero, P. Johnson, P.-L. Dallaire-Demers, N. Sawaya, P. Narang, I. Kivlichan, M. Wasielewski, and A. Aspuru-Guzik, Quantum information and computation for chemistry, *arXiv preprint arXiv:1706.05413* (2017).
 - [15] Y. Cao, J. Romero, J. P. Olson, M. Degroote, P. D. Johnson, M. Kieferová, I. D. Kivlichan, T. Menke, B. Peropadre, N. P. Sawaya, *et al.*, Quantum chemistry in the age of quantum computing, *Chemical reviews* **119**, 10856 (2019).
 - [16] A. Robert, P. K. Barkoutsos, S. Woerner, and I. Tavernelli, Resource-efficient quantum algorithm for protein folding, *arXiv preprint arXiv:1908.02163* (2019).
 - [17] A. Di Paolo, P. K. Barkoutsos, I. Tavernelli, and A. Blais, Variational quantum simulation of ultrastrong light-matter coupling, *arXiv preprint arXiv:1909.08640* (2019).
 - [18] B. T. Gard, L. Zhu, G. S. Barron, N. J. Mayhall, S. E. Economou, and E. Barnes, Efficient symmetry-preserving state preparation circuits for the variational quantum eigensolver algorithm, *npj Quantum Information* **6**, 1 (2020).
 - [19] P. K. Barkoutsos, J. F. Gonthier, I. Sokolov, N. Moll, G. Salis, A. Fuhrer, M. Ganzhorn, D. J. Egger, M. Troyer, A. Mezzacapo, *et al.*, Quantum algorithms for electronic structure calculations: Particle-hole hamiltonian and optimized wave-function expansions, *Physical Review A* **98**, 022322 (2018).
 - [20] R. Sagastizabal, X. Bonet-Monroig, M. Singh, M. Rol, C. Bultink, X. Fu, C. Price, V. Ostroukh, N. Muthusubramanian, A. Bruno, *et al.*, Error mitigation by symmetry verification on a variational quantum eigensolver, *arXiv preprint arXiv:1902.11258* (2019).
 - [21] M. Ganzhorn, D. J. Egger, P. Barkoutsos, P. Ollitrault, G. Salis, N. Moll, M. Roth, A. Fuhrer, P. Mueller, S. Woerner, *et al.*, Gate-efficient simulation of molecular eigenstates on a quantum computer, *Physical Review Applied* **11**, 044092 (2019).
 - [22] C. Cade, L. Mineh, A. Montanaro, and S. Stanisic, Strategies for solving the fermi-hubbard model on near-term quantum computers, *arXiv preprint arXiv:1912.06007* (2019).
 - [23] A. Montanaro and S. Stanisic, Compressed variational quantum eigensolver for the fermi-hubbard model, *arXiv preprint arXiv:2006.01179* (2020).
 - [24] D. Wecker, M. B. Hastings, and M. Troyer, Progress towards practical quantum variational algorithms, *Physical*

- Review A **92**, 042303 (2015).
- [25] A. Kandala, A. Mezzacapo, K. Temme, M. Takita, M. Brink, J. M. Chow, and J. M. Gambetta, Hardware-efficient variational quantum eigensolver for small molecules and quantum magnets, *Nature* **549**, 242 (2017).
 - [26] P.-L. Dallaire-Demers, J. Romero, L. Veis, S. Sim, and A. Aspuru-Guzik, Low-depth circuit ansatz for preparing correlated fermionic states on a quantum computer, *Quantum Science and Technology* **4**, 045005 (2019).
 - [27] J. Romero, R. Babbush, J. R. McClean, C. Hempel, P. J. Love, and A. Aspuru-Guzik, Strategies for quantum computing molecular energies using the unitary coupled cluster ansatz, *Quantum Science and Technology* **4**, 014008 (2018).
 - [28] I. D. Kivlichan, J. McClean, N. Wiebe, C. Gidney, A. Aspuru-Guzik, G. K.-L. Chan, and R. Babbush, Quantum simulation of electronic structure with linear depth and connectivity, *Physical review letters* **120**, 110501 (2018).
 - [29] A. J. Woitzik, P. K. Barkoutsos, F. Wudarski, A. Buchleitner, and I. Tavernelli, Entanglement production and convergence properties of the variational quantum eigensolver, *arXiv preprint arXiv:2003.12490* (2020).
 - [30] S. Sim, P. D. Johnson, and A. Aspuru-Guzik, Expressibility and entangling capability of parameterized quantum circuits for hybrid quantum-classical algorithms, *Advanced Quantum Technologies* **2**, 1900070 (2019).
 - [31] J. R. McClean, S. Boixo, V. N. Smelyanskiy, R. Babbush, and H. Neven, Barren plateaus in quantum neural network training landscapes, *Nature communications* **9**, 4812 (2018).
 - [32] F. Verstraete, J. I. Cirac, and J. I. Latorre, Quantum circuits for strongly correlated quantum systems, *Physical Review A* **79**, 032316 (2009).
 - [33] A. J. Ferris, Fourier transform for fermionic systems and the spectral tensor network, *Physical review letters* **113**, 010401 (2014).
 - [34] Z. Jiang, K. J. Sung, K. Kechedzhi, V. N. Smelyanskiy, and S. Boixo, Quantum algorithms to simulate many-body physics of correlated fermions, *Physical Review Applied* **9**, 044036 (2018).
 - [35] J. A. Fleck, J. Morris, and M. Feit, Time-dependent propagation of high energy laser beams through the atmosphere, *Applied physics* **10**, 129 (1976).
 - [36] M. Feit, J. Fleck Jr, and A. Steiger, Solution of the schrödinger equation by a spectral method, *Journal of Computational Physics* **47**, 412 (1982).
 - [37] R. Babbush, N. Wiebe, J. McClean, J. McClain, H. Neven, and G. K.-L. Chan, Low-depth quantum simulation of materials, *Physical Review X* **8**, 011044 (2018).
 - [38] D. Dong and I. R. Petersen, Quantum control theory and applications: a survey, *IET Control Theory & Applications* **4**, 2651 (2010).
 - [39] M. James, Quantum control theory (2014), *arXiv:1406.5260 [quant-ph]*.
 - [40] N. Khaneja, T. Reiss, C. Kehlet, T. Schulte-Herbrüggen, and S. J. Glaser, Optimal control of coupled spin dynamics: design of nmr pulse sequences by gradient ascent algorithms, *Journal of magnetic resonance* **172**, 296 (2005).
 - [41] F. Motzoi, J. M. Gambetta, S. Merkel, and F. Wilhelm, Optimal control methods for rapidly time-varying hamiltonians, *Physical Review A* **84**, 022307 (2011).
 - [42] D. d'Alessandro, *Introduction to quantum control and dynamics* (CRC press, 2007).
 - [43] S. A. Rice, Interfering for the good of a chemical reaction, *Nature* **409**, 422 (2001).
 - [44] M. Shapiro and P. Brumer, Quantum control of bound and continuum state dynamics, *Physics Reports* **425**, 195 (2006).
 - [45] N. Khaneja, T. Reiss, B. Luy, and S. J. Glaser, Optimal control of spin dynamics in the presence of relaxation, *Journal of Magnetic Resonance* **162**, 311 (2003).
 - [46] R. W. Heeres, P. Reinhold, N. Ofek, L. Frunzio, L. Jiang, M. H. Devoret, and R. J. Schoelkopf, Implementing a universal gate set on a logical qubit encoded in an oscillator, *Nature Communications* **8**, 94 (2017).
 - [47] H. R. Grimsley, S. E. Economou, E. Barnes, and N. J. Mayhall, Adapt-vqe: An exact variational algorithm for fermionic simulations on a quantum computer, *arXiv preprint arXiv:1812.11173* (2018).
 - [48] H. L. Tang, E. Barnes, H. R. Grimsley, N. J. Mayhall, and S. E. Economou, qubit-adapt-vqe: An adaptive algorithm for constructing hardware-efficient ansatzes on a quantum processor, *arXiv preprint arXiv:1911.10205* (2019).
 - [49] G. Ortiz, J. E. Gubernatis, E. Knill, and R. Laflamme, Quantum algorithms for fermionic simulations, *Physical Review A* **64**, 022319 (2001).
 - [50] G. Ortiz, J. Gubernatis, E. Knill, and R. Laflamme, Erratum: Quantum algorithms for fermionic simulations [phys. rev. a 64, 022319 2001], *Physical Review A* **65**, 029902 (2002).
 - [51] J. Hubbard, Electron correlations in narrow energy bands, *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences* **276**, 238 (1963).
 - [52] S. Yamada, T. Imamura, and M. Machida, 16.447 tflops and 159-billion-dimensional exact-diagonalization for trapped fermion-hubbard model on the earth simulator, in *SC'05: Proceedings of the 2005 ACM/IEEE Conference on Supercomputing* (IEEE, 2005) pp. 44-44.
 - [53] K. Masuda and D. Yamamoto, Variational cluster approach to s-wave pairing in heavy-fermion superconductors, *Physical Review B* **91**, 104508 (2015).
 - [54] M. Guillot, *Compétition entre l'antiferromagnétisme et la supraconductivité dans le modèle de Hubbard appliqué aux cuprates* (Université de Sherbrooke., 2007).
 - [55] J. Kaczmarczyk, J. Spałek, T. Schickling, and J. Bünnemann, Superconductivity in the two-dimensional hubbard model: Gutzwiller wave function solution, *Physical Review B* **88**, 115127 (2013).
 - [56] P.-L. Dallaire-Demers, M. Stechly, J. F. Gonthier, N. T. Bashige, J. Romero, and Y. Cao, An application benchmark for fermionic quantum simulations, *arXiv preprint arXiv:2003.01862* (2020).
 - [57] M. Wilson, S. Stromswold, F. Wudarski, S. Hadfield, N. M. Tubman, and E. Rieffel, Optimizing quantum heuristics with meta-learning, *arXiv preprint arXiv:1908.03185* (2019).
 - [58] J.-M. Reiner, F. Wilhelm-Mauch, G. Schön, and M. Marthaler, Finding the ground state of the hubbard model by variational methods on a quantum computer with gate errors, *Quantum Science and Technology* **4**, 035005 (2019).
 - [59] G. Verdon, M. Broughton, J. R. McClean, K. J. Sung, R. Babbush, Z. Jiang, H. Neven, and M. Mohseni, Learning to learn with quantum neural networks via clas-

- sical neural networks, arXiv preprint arXiv:1907.05415 (2019).
- [60] I. O. Sokolov, P. K. Barkoutsos, P. J. Ollitrault, D. Greenberg, J. Rice, M. Pistoia, and I. Tavernelli, Quantum orbital-optimized unitary coupled cluster methods in the strongly correlated regime: Can quantum algorithms outperform their classical equivalents?, *The Journal of Chemical Physics* **152**, 124107 (2020).
 - [61] L. Xu, J. T. Lee, and J. Freericks, Test of the unitary coupled-cluster variational quantum eigensolver for a simple strongly correlated condensed-matter system, arXiv preprint arXiv:2001.06957 (2020).
 - [62] S. Hadfield, Z. Wang, B. O’Gorman, E. G. Rieffel, D. Venturelli, and R. Biswas, From the quantum approximate optimization algorithm to a quantum alternating operator ansatz, *Algorithms* **12**, 34 (2019).
 - [63] J. D. Whitfield, J. Biamonte, and A. Aspuru-Guzik, Simulation of electronic structure hamiltonians using quantum computers, *Molecular Physics* **109**, 735 (2011).
 - [64] X. Bonet-Monroig, R. Sagastizabal, M. Singh, and T. O’Brien, Low-cost error mitigation by symmetry verification, *Physical Review A* **98**, 062339 (2018).
 - [65] R. Sagastizabal, X. Bonet-Monroig, M. Singh, M. A. Rol, C. Bultink, X. Fu, C. Price, V. Ostroukh, N. Muthusubramanian, A. Bruno, *et al.*, Experimental error mitigation via symmetry verification in a variational quantum eigensolver, *Physical Review A* **100**, 010302 (2019).
 - [66] K. Temme, S. Bravyi, and J. M. Gambetta, Error mitigation for short-depth quantum circuits, *Physical review letters* **119**, 180509 (2017).
 - [67] S. Endo, S. C. Benjamin, and Y. Li, Practical quantum error mitigation for near-future applications, *Physical Review X* **8**, 031027 (2018).
 - [68] A. Kandala, K. Temme, A. D. Corcoles, A. Mezzacapo, J. M. Chow, and J. M. Gambetta, Extending the computational reach of a noisy superconducting quantum processor, arXiv preprint arXiv:1805.04492 (2018).
 - [69] Contributors, Qiskit: An open-source framework for quantum computing (2019).
 - [70] P. J. O’Malley, R. Babbush, I. D. Kivlichan, J. Romero, J. R. McClean, R. Barends, J. Kelly, P. Roushan, A. Tranter, N. Ding, *et al.*, Scalable quantum simulation of molecular energies, *Physical Review X* **6**, 031007 (2016).
 - [71] N. Vogt, S. Zanker, J.-M. Reiner, T. Eckl, A. Maruszczyk, and M. Marthaler, Preparing symmetry broken ground states with variational quantum algorithms, arXiv preprint arXiv:2007.01582 (2020).
 - [72] M. J. Powell, A direct search optimization method that models the objective and constraint functions by linear interpolation, in *Advances in optimization and numerical analysis* (Springer, 1994) pp. 51–67.
 - [73] M. J. Powell, Direct search algorithms for optimization calculations, *Acta numerica* **7**, 287 (1998).
 - [74] M. J. Powell, A view of algorithms for optimization without derivatives, *Mathematics Today-Bulletin of the Institute of Mathematics and its Applications* **43**, 170 (2007).

Appendix A: Jordan-Wigner fermionic encoding

In the Jordan-Wigner transformation, each fermionic site is encoded into the state of two qubits with the

mapping $(0, \uparrow, \downarrow, \uparrow\downarrow) \mapsto (00, 01, 10, 11)$. Moreover, the fermionic ladder operators take the form

$$\begin{aligned} \hat{a}_p &\mapsto \hat{\sigma}_p \bigotimes_{l < p} \hat{Z}_l, \\ \hat{a}_p^\dagger &\mapsto \hat{\sigma}_p^\dagger \bigotimes_{l < p} \hat{Z}_l, \end{aligned} \quad (\text{A1})$$

where $\hat{\sigma} = |0\rangle\langle 1|$, \hat{Z} is the Pauli-Z operator and the indices denote the spin orbitals or qubits. For a lattice of L sites, we arrange the $N = 2L$ spin orbitals as $|f_{1\uparrow} \dots f_{L\uparrow}; f_{1\downarrow} \dots f_{L\downarrow}\rangle$ with $f_p \in \{0, 1\}$ the occupation of spin-orbital p .

With this mapping, hopping terms between spin-orbitals p and q with $p < q$ transform as

$$\hat{a}_p^\dagger \hat{a}_q + \hat{a}_q^\dagger \hat{a}_p \mapsto \frac{1}{2} (\hat{X}_p \hat{X}_q + \hat{Y}_p \hat{Y}_q) \bigotimes_{l=p+1}^{q-1} \hat{Z}_l, \quad (\text{A2})$$

where \hat{X} , \hat{Y} and \hat{Z} are Pauli matrices. The product of \hat{Z} operators, referred to as the JW string, vanishes when $q = p + 1$. Moreover, the number operator on spin-orbital p , and therefore the onsite Coulomb interaction between spin-orbitals p and q take the form

$$\begin{aligned} \hat{n}_p &= \hat{a}_p^\dagger \hat{a}_p \mapsto \frac{1}{2} (\hat{I} - \hat{Z}_p), \\ \hat{n}_p \hat{n}_q &\mapsto \frac{1}{4} (\hat{I} - \hat{Z}_p - \hat{Z}_q + \hat{Z}_p \hat{Z}_q). \end{aligned} \quad (\text{A3})$$

At half-filling, the single \hat{Z} s coming from the onsite interaction terms are canceled by similar terms arising from the chemical potential, leading to a simple expression for the potential

$$\hat{V} \mapsto \frac{U}{4} \sum_{i=1}^L \hat{Z}_{i\uparrow} \hat{Z}_{i\downarrow}, \quad (\text{A4})$$

which is diagonal in the computational basis.

Appendix B: Parametrization of the ansätze

1. Full parametrization

This strategy corresponds to taking all (or almost all) gate angles as variational parameters. This gives the classical optimizer enough freedom to explore the Hilbert space spanned by the ansatz at the cost of a longer optimization time. We note that the HEA has, by default, a *fully parametrized* configuration since all single-qubit gates are parametrized. Moreover, the same strategy for VHA consists of assigning one parameter to every $\hat{a}_{i\sigma}^\dagger \hat{a}_{j\sigma} + \text{h.c.}$ hopping terms and duplicating the parameter to take into account the two spin orientations. This is because at half-filling and zero total spin, there is a spin-inversion symmetry which removes the need to

treat spins up and down differently. Additionally, every term of the on-site interaction is associated with a variational parameter. The asymptotic scaling of number of variational parameters for all ansätze is summarized in Table III for both parametrization strategies.

2. Scalable parametrization

In a scalable parametrization strategy, we employ a number of variational parameters that is independent of the system size. Because there are fewer parameters, we expect the optimization to be faster, but larger circuit depths might be necessary to achieve the same accuracy as full parametrization.

Although it is less clear how one would achieve a scalable parametrization for hardware-efficient approaches, a simple strategy exists for physics-inspired ansätze such as QOCA. It consists in grouping the individual terms of the Hamiltonian into a constant number of sets containing commuting terms. For example, a common way of grouping the different terms of the FHM on a 2D lattice is

$$\hat{H}_{\text{FHM}} = \hat{H}_{h,\text{even}} + \hat{H}_{h,\text{odd}} + \hat{H}_{v,\text{even}} + \hat{H}_{v,\text{odd}} + \hat{H}_U, \quad (\text{B1})$$

where the first four terms now group the even and odd, vertical and horizontal hopping terms, while \hat{H}_U collects the on-site interaction terms. Note that for the 3D FHM, two additional sets of hopping terms covering the third dimension would be necessary.

	Full parametrization	Scalable parametrization
HEA	$2Ld$	–
VHA	$(\eta + 1)Ld$	$(2\eta + 1)d$
FT-VHA	$(\eta + 1)Ld$	$(\eta + 1)d$
QOCA	$(\eta + 3)Ld$	$(2\eta + 3)d$
sQOCA	$3Ld$	$3d$

TABLE III. Asymptotic scaling of the number of variational parameters of the ansätze of this work for the full and scalable parametrization strategies. These numbers are for periodic η -dimensional Fermi-Hubbard systems of L lattice sites. d is the number of layers of the ansätze.

Appendix C: Numerical simulations

All simulations are done using Qiskit Aqua’s VQA tools [69]. Because noise is not considered, a unitary statevector simulator is used. For simplicity, we also assumed all-to-all connectivity of the qubits, although this is not strictly needed. We chose the COBYLA [72–74] method as the classical optimizer with a maximum number of function evaluation of $\sim 10^5$. This number was justified as being reasonable in [22] using experimentally realistic arguments.

Whenever possible, we initialize all variational parameters to zero. With this choice, Hamiltonian-based ansätze implement the identity operator at the start of the optimization routine and the variational search begins from the initial state. In contrast to a random initialization of the parameters, this strategy also avoids the need of doing repeated VQA runs and post-selecting the best results. However, in the case of short-QOCA, this strategy results in premature convergence of the optimizer into states close to the initial guess, forcing us to use a random initialization of the parameters. Interestingly, even without post-selection, this did not hinder the convergence capability thanks to the robustness of QOCA regarding initial conditions.

Finally, all layers of the ansätze are optimized simultaneously. Further improvement can potentially be achieved by adopting a layer-by-layer optimization strategy as in Ref. [24].

For the simulation of the water molecule, we use the PySCF driver to obtain the Hamiltonian as provided

Appendix D: Initial states

In most quantum simulations of the FHM reported in the literature [22–24, 26, 58, 59, 61], the initial state is the ground state of the non-interacting FHM *i.e.* fixing $U = \mu = 0$ in Eq. (11). Because the resulting Hamiltonian is diagonal in Fourier space, this is a convenient choice because the ground state is readily computed classically. However, preparing this on a quantum computer generally requires very long quantum circuits as it involves the fermionic Fourier transformation. Current implementations of this transformation [32, 34, 37] are defined only for periodic systems, which limits this initial state’s applicability. To the best of our knowledge, no implementation of an open-boundary-conditions fermionic Fourier transformation has been developed to date. Furthermore, the ground state of the non-interacting FHM can be degenerate which makes it difficult to choose which one or superposition thereof to use. This challenge is often pointed out as an open problem [22, 61], since in most VQA realization, prior knowledge of the target state is used to find the initial state that maximizes the fidelity. It is unclear how one would make this choice as systems grow computationally intractable.

1. The non-interacting Fermi-Hubbard model

To see how this degeneracy arises, we consider the 1D non-interacting FHM ($U = \mu = 0$) with L sites and periodic boundary conditions. In momentum space, the Hamiltonian is given by a collection of free fermionic modes

$$\hat{\mathcal{T}} = \text{FT } \hat{T} \text{ FT}^\dagger = \sum_{k,\sigma=\{\uparrow,\downarrow\}} \varepsilon_k \hat{c}_{k\sigma}^\dagger \hat{c}_{k\sigma}, \quad (\text{D1})$$

where the energy spectrum is

$$\varepsilon_k = -2t \cos\left(\frac{2\pi k}{L}\right). \quad (\text{D2})$$

In the above Hamiltonian, $\hat{c}_{k\sigma}^\dagger$ and $\hat{c}_{k\sigma}$ are respectively the creation and annihilation fermionic operators of momentum k and spin σ . They are obtained from the real-space ladder operators $\hat{a}_{k\sigma}^\dagger$ and $\hat{a}_{k\sigma}$ and the fermionic Fourier transformation as

$$\hat{c}_{k\sigma}^\dagger = \text{FT} \hat{a}_{k\sigma}^\dagger \text{FT}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{j=0}^{L-1} e^{-i\frac{2\pi k}{L}j} \hat{a}_{j\sigma}^\dagger, \quad (\text{D3})$$

$$\hat{c}_{k\sigma} = \text{FT} \hat{a}_{k\sigma} \text{FT}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{j=0}^{L-1} e^{i\frac{2\pi k}{L}j} \hat{a}_{j\sigma}. \quad (\text{D4})$$

Because k can only take discrete values, one notices that a degeneracy appears when there are energy levels at $\varepsilon_k = 0$ since these levels could be occupied or empty without affecting the ground state energy. It is straightforward to see from Eq. (D2) that this can happen only when $L = 4l$, with l an integer. In this case, there are two values of k (corresponding to $k = l$ and $k = 3l$) which leads to $\varepsilon_k = 0$. The degeneracy is therefore $4^2 = 16$ since each momentum mode can be empty, occupied by a \uparrow or \downarrow spin, or both. In the half-filled symmetry sector, the degeneracy is reduced to $\binom{4}{2} = 6$. Note that in the case $L \neq 4l$, the ground state of the non-interacting FHM is not degenerate and is a simple basis state in momentum space.

As mentioned above, this occasional degeneracy makes it difficult to guess which basis state (or superposition thereof) is the best initial state to use in a VQA. Although, one can select states that respect certain desired properties such as particle number, total spin and total momentum.

Typically, the degeneracy at $L = 4l$ can be lifted by applying a small perturbative Coulomb interaction U . In this case, the ground state of the non-interacting FHM

becomes a superposition of basis states in Fourier space. One must apply the FT^\dagger in order to transform this initial state into real space for the VQA.

2. Choosing and preparing the initial states

In the case of $L = 4$ (or 2×2), we computed the fidelity of the 16 degenerate ground states of Eq. (D1) with respect to the target ground state and post-selected the ones leading to the highest fidelity. This strategy is, of course, not scalable and therefore it remains unclear how one would proceed in practice in the case where the fidelity with the target ground state cannot be computed beforehand.

In the present case, this strategy yields two ground states with a fidelity of ≈ 0.425 with respect to the ground state of the full model. Labeling the spin orbitals $|f_{1\uparrow} \dots f_{L\uparrow}; f_{1\downarrow} \dots f_{L\downarrow}\rangle$, these two states in real space are

$$|\Omega_T^{(1)}\rangle = \text{FT}^\dagger |1100; 1100\rangle, \quad (\text{D5})$$

$$|\Omega_T^{(2)}\rangle = \text{FT}^\dagger |1001; 1001\rangle. \quad (\text{D6})$$

Preparing these two states requires applying Pauli- X gates on selected qubits followed by the fermionic Fourier transformation, something which requires long quantum circuits [32, 34, 37].

Adding a small perturbation $U = 1 \times 10^{-5}t$, we find that the following superposition of $|\Omega_T^{(1)}\rangle$ and $|\Omega_T^{(2)}\rangle$ yields a significantly larger fidelity to the true ground state of ≈ 0.85 :

$$\begin{aligned} |\Omega_T\rangle &= \frac{|\Omega_T^{(1)}\rangle - |\Omega_T^{(2)}\rangle}{\sqrt{2}} \\ &= \text{FT}^\dagger \frac{|1100; 1100\rangle - |1001; 1001\rangle}{\sqrt{2}}. \end{aligned} \quad (\text{D7})$$

This, however, increases the complexity of the initial state preparation.

3.3 Compléments de résultats

Cette section a pour but de présenter des résultats additionnels ne figurant pas dans l'article de la section précédente. Premièrement, je présente des courbes de convergence pour un amas 2×1 du modèle de Fermi-Hubbard, ce qui expose le besoin d'investiguer des systèmes de plus grande taille. Ensuite, je montre que de briser la symétrie du nombre de particules mène à une convergence plus précise dans le cas de QOCA même lorsque l'état initial est plus compliqué. Finalement, je présente l'effet du remplissage fermionique du système sur les performances des formes variationnelles.

3.3.1 Modèle de Fermi-Hubbard à deux sites

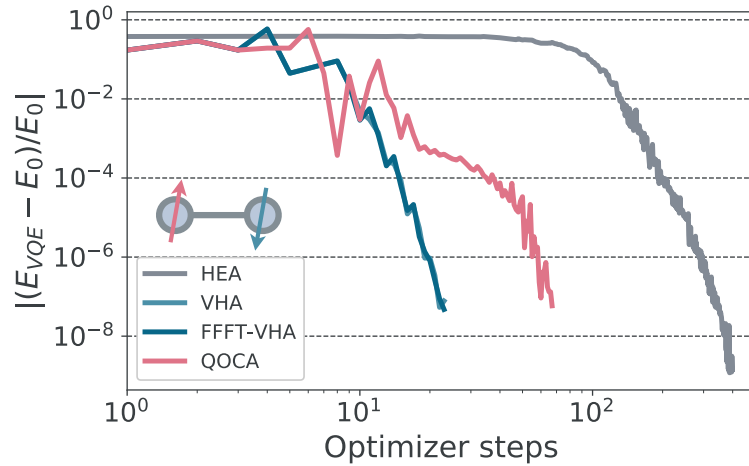


FIGURE 3.2 Erreur commise sur l'énergie dans l'état variationnel en fonction du nombre d'itérations dans la boucle du VQA pour les formes variationnelles HEA, VHA, FFFT-VHA et QOCA appliquées au modèle de Fermi-Hubbard 2×1 à demi-rempli. L'état initial utilisé correspond à l'état fondamental non-dégénéré de \hat{T} .

Dans l'article, je mentionne avoir obtenu une convergence précise pour toutes les FOV lorsqu'appliquées au modèle de Fermi-Hubbard de taille 2×1 . Les résultats derrière cette affirmation sont présentés à la figure 3.2 où on y voit des courbes de convergence pour différentes approches. Plus précisément, j'y trace l'erreur relative commise sur l'énergie du fondamental en fonction du nombre d'itérations dans la boucle du VQA. Premièrement, on remarque que toutes les formes variationnelles, soit HEA, VHA, FFFT-VHA et QOCA, atteignent des précisions de $\epsilon < 10^{-7}$ en $\mathcal{O}(10)$ à $\mathcal{O}(100)$ itérations. L'ordre dans lequel les FOV convergent, en terme du nombre d'itérations, est bien expliqué par la quantité de

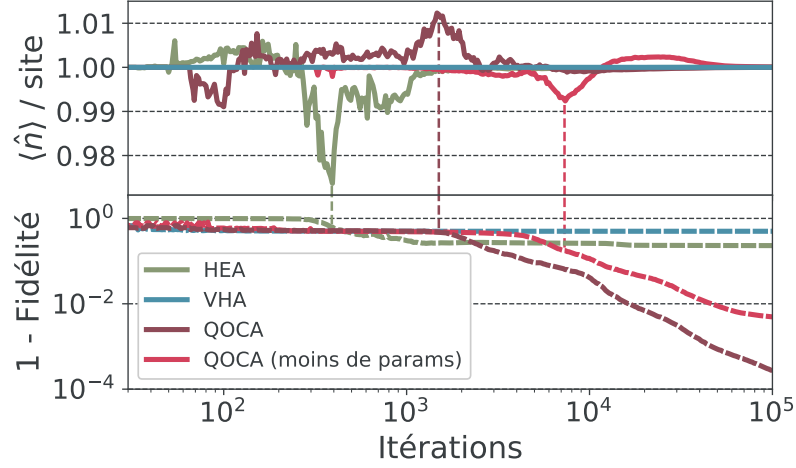


FIGURE 3.3 En haut : Nombre moyen de particules par site du réseau dans l'état variationnel à chaque itération du VQA. En bas : infidélité à l'état variationnel par rapport à l'état fondamental du modèle Fermi-Hubbard. Les résultats sont pour un système de taille 2×2 et l'état initial est $|\psi_0\rangle = \text{FT}^\dagger |1001; 1001\rangle$ pour toutes les formes variationnelles. Ce dernier correspond à un des multiples états fondamentaux dégénérés de \hat{T} . Une profondeur de $d = 6$ a été utilisée pour toutes les FOV, mais ce comportement est observé pour la plupart des valeurs de d .

paramètres variationnels qu'ils possèdent. En effet, VHA et FT-VHA présentent 2 paramètres, QOCA en a 4 et HEA, 16. Il est donc concevable qu'une optimisation dans un espace à 16 dimensions demande plus d'itérations qu'en deux dimensions. Une seule profondeur de la forme variationnelle est utilisée pour VHA, FT-VHA ainsi que QOCA et deux couches pour HEA. Pour toutes les simulations, l'état initial correspond au fondamental (non-dégénéré) de la partie cinétique du Hamiltonien, \hat{T} .

Ces résultats ne nous permettent pas de bien comparer la performance des différentes approches, car elles convergent toutes vers l'état cible. Je fais l'hypothèse que cela est dû à la trop petite taille de l'espace de Hilbert des quatre qubits encodant le système 2×1 du modèle de Hubbard. En effet, il est possible que les FOV couvrent facilement tout le sous-secteur d'intérêt et donc la probabilité qu'ils demeurent pris dans un minimum local se voit diminuée. Cette constatation nous a forcé à étudier des systèmes de plus grande taille où on peut commencer à voir certaines approches faillir.

3.3.2 Brisure de symétrie avec un état initial plus compliqué

Dans cette courte section, je présente des résultats similaires à la figure 4 de l'article, mais où un état initial différent a été utilisé. À la figure 3.3, je trace l'évolution du nombre moyen de particules par site fermionique ainsi que l'infidélité de l'état variationnel au cours de la routine d'optimisation. On y trouve des données pour HEA, VHA, QOCA et la variante de QOCA ayant moins de paramètres (*scalable-QOCA*), pour utiliser la même notation que dans l'article. L'état initial utilisé est un des multiples états fondamentaux dégénérés de \hat{T} . Ce dernier est pré-sélectionné, car il présente le plus grand recouvrement avec l'état fondamental du Hamiltonien total. Plus formellement, cet état initial, dans l'espace réel, est donné par

$$|\psi_0\rangle = \text{FT}^\dagger |1001; 1001\rangle, \quad (3.1)$$

où FT représente le circuit implémentant la transformation de Fourier fermionique [91, 152, 154, 155]. Cet état correspond à $|\Omega_T^{(2)}\rangle$ de l'équation (D6) de l'article. Je réfère le lecteur à l'annexe D de l'article pour plus de détails. Je rappelle que l'infidélité de l'état s'écrit

$$1 - \text{Fidélité} = 1 - |\langle\psi(\boldsymbol{\theta})|\Omega\rangle|^2, \quad (3.2)$$

où $|\psi(\boldsymbol{\theta})\rangle$ est l'état variationnel et $|\Omega\rangle$ le fondamental du modèle de Fermi-Hubbard.

La même discussion que dans l'article s'applique à la figure 3.3 si ce n'est que les pics amorçant les descentes abruptes d'infidélité sont d'autant plus définis. Ceci nous permet de conclure que de faiblement briser certaines symétries du Hamiltonien est bénéfique même si l'état initial est plus structuré.

3.3.3 Étude du remplissage

Dans cette section, je m'intéresse à l'effet du remplissage fermionique de l'état cible sur la performance des FOV. Pour ce faire, je trace à la figure 3.4 la fidélité de l'état variationnel final pour le HEA, VHA et QOCA en fonction du remplissage. La valeur du remplissage est modifiée en ajustant la valeur de μ dans le Hamiltonien de Fermi-Hubbard (2.7). Le demi-remplissage se produit lorsque $\mu = U/2$ et signifie qu'il y a en moyenne une particule par site fermionique dans l'état fondamental. Il est à noter que le FHM présente une symétrie particule-trou, ce qui explique pourquoi les graphiques sont symétriques autour du demi-remplissage. L'état initial utilisé correspond à l'état fondamental (dégénéré) de \hat{T} ayant le plus grand recouvrement avec l'état cible. Notez que puisque l'état fondamental change selon le remplissage, l'état initial varie également. Une liste des différents états initiaux utilisés est

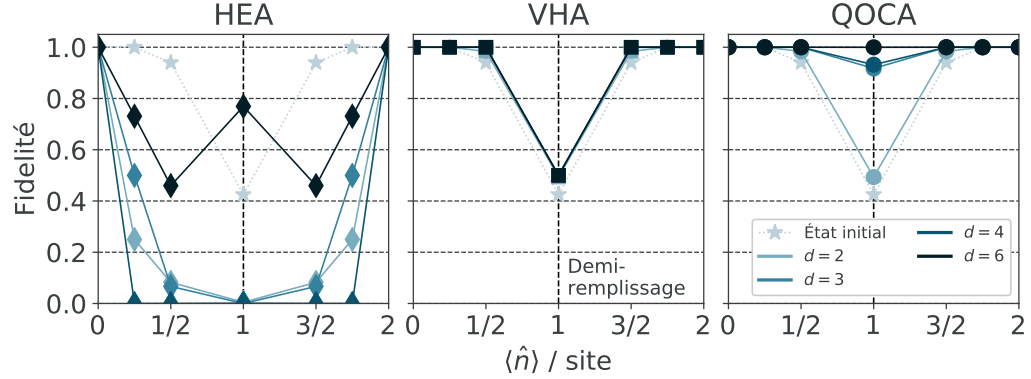


FIGURE 3.4 Fidélité de l'état final du VQA avec l'état fondamental exact du modèle de Fermi-Hubbard en fonction du remplissage fermionique de l'état fondamental. Le demi-remplissage se produit lorsqu'il y a en moyenne un fermion par site de réseau. Les résultats sont présentés pour les formes variationnelles, HEA, VHA et QOCA, et pour des profondeurs allant jusqu'à $d = 6$. Les données associées au symbole \star représentent la fidélité de l'état initial utilisé, soit un des états fondamentaux dégénérés du FHM sans interaction.

présentée au tableau 3.1. Évidemment, les remplissages 0 et 8 sont des cas triviaux puisque l'état fondamental correspond exactement aux états initiaux.

TABLE 3.1 États initiaux utilisés pour l'étude du remplissage fermionique de la figure 3.4

Remplissage	État initial $ \psi_0\rangle$
0	$ 0000; 0000\rangle$
1	$FT^\dagger 1000; 0000\rangle$
2	$FT^\dagger 1000; 1000\rangle$
4	$FT^\dagger 1001; 1001\rangle$
6	$FT^\dagger 1101; 1101\rangle$
7	$FT^\dagger 1101; 1111\rangle$
8	$ 1111; 1111\rangle$

Dans la figure 3.4, les courbes d'états initiaux sont indiqués par une étoile \star . On observe un creux de part et d'autre du demi-remplissage, ce qui témoigne de la difficulté de ce régime. En effet, à demi-remplissage, le recouvrement de l'état initial avec le fondamental n'est que de ~ 0.425 . Cependant, cette valeur se voit doublée à ~ 0.85 lorsqu'une superposition de fondamentaux de \hat{T} est employée comme état initial. Plus de détails sur cet état se trouvent

à l'annexe D de l'article.

En analysant la figure 3.4, on remarque premièrement que HEA éprouve de la difficulté à converger, peu importe le remplissage. Les bonnes performances spontanées du HEA, comme à $d = 6$ au demi-remplissage, peuvent être expliquées par le fait que la forme variationnelle a démarré l'optimisation en empruntant la bonne direction dans l'espace de Hilbert. Effectivement, le fait que sa recherche variationnelle ne soit pas structurée a pour conséquence que son succès est imprévisible et généralement, plusieurs tentatives sont nécessaires pour obtenir des résultats satisfaisants. De plus, étant donné que HEA ne conserve pas le nombre de particules, sa performance ne bénéficie pas forcément d'un état initial figurant dans le bon secteur de symétrie. Effectivement, la FOV risque de sortir l'état variationnel de ce secteur dès l'application des premières portes.

Deuxièmement, on observe que VHA a du succès à converger pour tous les remplissages à l'exception du demi-remplissage où le VQA échoue systématiquement. Ceci s'explique par le fait que l'état initial à demi-rempli a un recouvrement avec le fondamental qui soit significativement moins grand qu'aux autres remplissages. Comme on le voit dans la figure 5 de l'article, VHA peut converger si la bonne superposition de fondamentaux de \hat{T} est utilisée. Ces résultats renforcent la conclusion que les formes variationnelles complètement structurées sur le problème sont extrêmement sensibles aux conditions initiales. Finalement, QOCA démontre une convergence pour tous les remplissages, ce qui témoigne de sa robustesse lorsqu'utilisé avec des états initiaux non-optimaux.

3.4 Avenues de recherche

Une conséquence de la grande modularité et flexibilité des algorithmes variationnels quantiques est que l'espace des avenues potentielles de recherche est grand. Par exemple, je pourrais refaire tout mon projet en utilisant un encodage fermionique différent, ou un autre optimiseur classique, ou encore en considérant les effets du bruit. Énormément de temps peut être consommé à explorer toutes les combinaisons possibles des meta-paramètres de l'algorithme. Dans le but d'épargner le temps de futurs étudiants ou étudiantes gradué.e.s, je vais élaborer sur quelques pistes de recherche que je considère comme intéressantes.

3.4.1 Autres termes brisant les symétries

Dans mon projet, j'explore uniquement l'effet de termes de pilotage de la forme

$$\hat{H}_1 = \sum_{j=1}^L (\hat{a}_j^\dagger + \hat{a}_j), \quad (3.3)$$

$$\hat{H}_2 = \sum_{j=1}^L i(\hat{a}_j^\dagger - \hat{a}_j), \quad (3.4)$$

et étant donné le succès instantané qu'ils ont apporté, mon exploration s'est arrêtée là. Cependant, la flexibilité de QOCA provient de la grande liberté qu'on a lors du choix ou de la conception de ces termes brisant les symétries. Il est donc intéressant d'étudier l'effet d'autres termes.

Il est possible d'utiliser l'intuition pour choisir les termes de pilotage. Effectivement, si on sait quelles symétries sont brisées dans l'état cible, on peut utiliser cette information pour construire des termes de pilotage adaptés au problème. Par exemple, si nous savons que l'état cible a un ordre anti-ferromagnétique et qu'aucun terme du Hamiltonien du problème ne décrit un tel ordre, nous pouvons penser à ajouter un terme qui a la forme d'un champ magnétique alterné

$$\hat{M} = h \sum_j (-1)^j \hat{S}_j^z, \quad (3.5)$$

où $\hat{S}_j^z = \hat{a}_{j,\uparrow}^\dagger \hat{a}_{j,\uparrow} - \hat{a}_{j,\downarrow}^\dagger \hat{a}_{j,\downarrow}$ est le spin total du site j et h est l'amplitude du champ magnétique. Cet ajout aura potentiellement l'effet d'induire un ordre anti-ferromagnétique dans l'état variationnel. De plus, si l'on souhaite renforcer la supraconductivité singulet, des termes de la forme

$$\sum_{i,j} \hat{a}_{i,\uparrow} \hat{a}_{j,\downarrow} + \hat{a}_{j,\uparrow} \hat{a}_{i,\downarrow} + \text{h.c.}, \quad (3.6)$$

ou plus généralement,

$$\sum_{i,j} \hat{a}_i \hat{a}_j + \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i^\dagger, \quad (3.7)$$

pourraient être utiles puisqu'ils créent et annihilent des paires de Cooper.

Une liste non exhaustive de termes de pilotage potentiels est présentée au tableau 3.2 pour le cas des systèmes bosoniques et fermioniques. Notez que tous les termes ne représentent pas des interactions réalisées dans des systèmes physiques.

TABLE 3.2 Termes de pilotage potentiels pour des systèmes bosoniques et fermioniques.

Bosons	
Pilotage linéaire bosonique	$\sum_j (\alpha_j(t) \hat{b}_j + \alpha_j^*(t) \hat{b}_j^\dagger)$
Interaction “self-Kerr”	$\sum_i K_i(t) \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i \hat{b}_i$
Interaction “cross-Kerr”	$\sum_{i \neq j} K_{ij}(t) \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i \hat{b}_j^\dagger \hat{b}_j$
Interaction “lame séparatrice”	$\sum_{i,j} \beta_{ij}(t) (\hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j + \hat{b}_j^\dagger \hat{b}_i)$
Compression simple-mode	$\sum_i (\zeta_i(t) \hat{b}_i^2 + \zeta_i^*(t) \hat{b}_i^{\dagger 2})$
Compression bi-mode	$\sum_{i \neq j} (\zeta_{ij}(t) \hat{b}_i \hat{b}_j + \zeta_{ij}^*(t) \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j^\dagger)$
Fermions	
Pilotage linéaire fermionique	$\sum_j (\alpha_j(t) \hat{a}_j + \alpha_j^*(t) \hat{a}_j^\dagger)$
Champ magnétique alterné	$h \sum_j (-1)^j \hat{S}_j^z$ $\hat{S}_j^z = \hat{a}_{j,\uparrow}^\dagger \hat{a}_{j,\uparrow} - \hat{a}_{j,\downarrow}^\dagger \hat{a}_{j,\downarrow}$
Interaction de Coulomb aux premiers voisins	$\sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} \hat{n}_{i,\sigma} \hat{n}_{j,\sigma}$ $\sum_{\langle i,j \rangle} (\hat{n}_{i,\uparrow} \hat{n}_{j,\downarrow} + \hat{n}_{i,\downarrow} \hat{n}_{j,\uparrow})$ $\hat{n}_{i,\sigma} = \hat{a}_{i,\sigma}^\dagger \hat{a}_{i,\sigma}$
Corrélations de paires singulets au premier voisin (super-échange) [156]	$-J \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{c}_{ij}^\dagger \hat{c}_{ij}$ $\hat{c}_{ij}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{a}_{i\uparrow}^\dagger \hat{a}_{j\downarrow}^\dagger - \hat{a}_{i\downarrow}^\dagger \hat{a}_{j\uparrow}^\dagger)$
Saut cohérent de paires [156]	$-\alpha J \sum_{\langle ijk \rangle}^{i \neq k} (\hat{c}_{ij}^\dagger \hat{c}_{jk} + \hat{c}_{jk}^\dagger \hat{c}_{ij})$
Interaction cubique fermionique	$\sum_{ijk} (\alpha_{ijk}(t) \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j \hat{a}_k + \beta_{ijk}(t) \hat{a}_i \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k$ $+ \gamma_{ijk}(t) \hat{a}_i \hat{a}_j \hat{a}_k^\dagger + \text{h.c.})$

3.4.2 Techniques d'optimisation avancées

J'ai porté moins d'attention à l'aspect optimisation classique des paramètres variationnels lors du développement de QOCA. Cependant, j'estime qu'une amélioration significative des résultats est possible si une technique plus optimale d'optimisation est élaborée.

Voici comment l'optimisation des paramètres s'effectue dans mon cas. Je vais distinguer deux catégories de paramètres variationnels : ceux associés au Hamiltonien du problème, dénotés $\theta = \{\theta_j^d\}$, et ceux devant les termes de pilotage, $\delta = \{\delta_j^d\}$. L'exposant d dénote la couche de l'Ansatz dans laquelle le paramètre se trouve et l'indice j indique qu'il est associé au j ème terme du Hamiltonien ou du pilotage. Les paramètres sont arrangés en un vecteur de sorte que ceux appartenant à une même couche soient regroupés

$$\Theta = \left(\begin{array}{cc|ccc} \theta_j^1 & \delta_j^1 & \dots & \theta_j^d & \delta_j^d \end{array} \right)^T. \quad (3.8)$$

L'indice \vec{j} indique que le vecteur contient tous les paramètres du Hamiltonien (ou du pilotage) de cette couche. L'optimisation s'effectue en bouclant sur ce vecteur en commençant par les paramètres du Hamiltonien de la première couche. Cette procédure persiste jusqu'à ce qu'une valeur optimale ou satisfaisante des paramètres soit atteinte

$$\tilde{\Theta} = \left(\begin{array}{cc|ccc} \tilde{\theta}_j^1 & \tilde{\delta}_j^1 & \dots & \tilde{\theta}_j^d & \tilde{\delta}_j^d \end{array} \right)^T. \quad (3.9)$$

où le tilde indique la valeur finale des paramètres. Puisque tous les paramètres figurent dans une unitaire donnée par l'exponentielle d'une chaîne de Pauli $e^{i\theta\hat{P}}$, l'opération paramétrée implémente l'identité lorsque $\theta = 0$.

Optimiser couche par couche

Il a été démontré par Wecker *et al.* [90] qu'une optimisation dite "couche par couche" permet une meilleure convergence. L'idée est assez générale et j'entrevois plusieurs façons de la réaliser pour optimiser un Ansatz de D couches. Je rappelle qu'à chaque fois qu'une couche est ajoutée à l'Ansatz, ses paramètres sont initialisés à 0 de sorte qu'elle implémente l'identité.

Stratégie 1 Optimiser un Ansatz avec $d = 1$ et utiliser les paramètres résultants comme valeurs initiales de la première couche d'un Ansatz avec $d = 2$. Optimiser toutes les couches simultanément. Répéter jusqu'à ce que $d = D$ où qu'une convergence satisfaisante soit

atteinte. Notez que l'optimisation devient plus difficile avec chaque couche additionnelle. Cette procédure peut être schématisée ainsi où \mathbf{d}_k regroupe tous les paramètres de la k ème couche, $\mathbf{0}$ est le vecteur nul et le crochet indique quelle(s) couche(s) se voit optimiser :

$$\begin{aligned}
 & \left(\begin{array}{cccc} \mathbf{d}_1 & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} \end{array} \right) \\
 \rightarrow & \left(\begin{array}{cccc} \mathbf{d}_1 & \mathbf{d}_2 & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} \end{array} \right) \\
 \rightarrow & \left(\begin{array}{cccc} \mathbf{d}_1 & \mathbf{d}_2 & \mathbf{d}_3 & \dots & \mathbf{0} \end{array} \right) \\
 & \vdots \\
 \rightarrow & \left(\begin{array}{cccc} \mathbf{d}_1 & \mathbf{d}_2 & \mathbf{d}_3 & \dots & \mathbf{d}_D \end{array} \right).
 \end{aligned}$$

Stratégie 2 Optimiser un Ansatz avec $d = 1$. À cet Ansatz optimisé, ajouter une couche, mais cette fois optimiser uniquement la couche $d = 2$. Répéter jusqu'à ce que la couche $d = D$ soit optimisée. Refaire cette procédure en sens inverse, soit en optimisant la couche $d = D - 1$ jusqu'à $d = 1$. Répéter ces *aller-retours* un certain nombre de fois ou jusqu'à ce que la convergence soit satisfaisante. De façon similaire, cette procédure peut être schématisée ainsi :

$$\begin{aligned}
 & \left(\begin{array}{cccc} \mathbf{d}_1 & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} \end{array} \right) \\
 \rightarrow & \left(\begin{array}{cccc} \mathbf{d}_1 & \mathbf{d}_2 & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} \end{array} \right) \\
 \rightarrow & \left(\begin{array}{cccc} \mathbf{d}_1 & \mathbf{d}_2 & \mathbf{d}_3 & \dots & \mathbf{0} \end{array} \right) \\
 & \vdots \\
 \rightarrow & \left(\begin{array}{cccc} \mathbf{d}_1 & \mathbf{d}_2 & \mathbf{d}_3 & \dots & \mathbf{d}_D \end{array} \right) \\
 & \vdots \\
 \rightarrow & \left(\begin{array}{cccc} \mathbf{d}_1 & \mathbf{d}_2 & \mathbf{d}_3 & \dots & \mathbf{d}_D \end{array} \right) \\
 \rightarrow & \left(\begin{array}{cccc} \mathbf{d}_1 & \mathbf{d}_2 & \mathbf{d}_3 & \dots & \mathbf{d}_D \end{array} \right) \\
 \rightarrow & \left(\begin{array}{cccc} \mathbf{d}_1 & \mathbf{d}_2 & \mathbf{d}_3 & \dots & \mathbf{d}_D \end{array} \right) \\
 & \vdots
 \end{aligned}$$

Une dernière étape où toutes les couches sont optimisées simultanément peut être ajoutée au coût de devoir traiter plus de paramètres. Cette stratégie est inspirée de l'étape de mise à jour des paramètres des algorithmes de DMRG et a été proposée par Agustin Di Paolo lors

d'une conversation privée. Elle permet notamment de s'assurer de toujours traiter un petit nombre de paramètres qui ne croît pas avec le nombre de couches.

Stratégie 3 Il est possible de penser à un mélange des deux dernières stratégies qui va comme suit :

$$\begin{aligned}
 & \left(\begin{array}{cccc} \underline{d_1} & 0 & 0 & \dots & 0 \end{array} \right) \\
 \rightarrow & \left(\begin{array}{cccc} \underline{d_1 \ d_2} & 0 & \dots & 0 \end{array} \right) \\
 \rightarrow & \left(\begin{array}{cccc} \underline{d_1 \ d_2 \ d_3} & \dots & 0 \end{array} \right) \\
 & \vdots \\
 \rightarrow & \left(\begin{array}{cccc} \underline{d_1 \ d_2 \ d_3 \ \dots \ d_D} \end{array} \right) \\
 & \vdots \\
 \rightarrow & \left(\begin{array}{cccc} \underline{d_1 \ d_2 \ d_3} & \dots & d_D \end{array} \right) \\
 \rightarrow & \left(\begin{array}{cccc} \underline{d_1 \ d_2} & d_3 & \dots & d_D \end{array} \right) \\
 \rightarrow & \left(\begin{array}{cccc} \underline{d_1} & d_2 & d_3 & \dots & d_D \end{array} \right) \\
 & \vdots
 \end{aligned}$$

Optimiser les paramètres du Hamiltonien en premier

Étant donné qu'une des forces de QOCA est qu'il soit majoritairement structuré autour du problème, il peut être avantageux d'entraîner d'abord les paramètres du Hamiltonien θ , puis d'*ouvrir* le pilotage en optimisant ses paramètres δ . Ceci permettrait à l'Ansatz de préalablement construire la variété de l'espace des paramètres qui respecte les symétries du Hamiltonien. Les termes de pilotage agiraient donc sur des états variationnels qui seraient potentiellement plus près de l'état cible étant déjà dans le bon secteur de symétrie. De cette façon, la recherche de raccourcis dans l'espace de Hilbert pourrait s'effectuer plus efficacement. Cette stratégie peut être utilisée conjointement avec la méthode couche-par-couche de la section précédente.

3.4.3 QOCA pour d'autres systèmes

Le même raisonnement qui a été fait pour les fermions lors du développement de la méthode QOCA s'applique également aux problèmes bosoniques et de spins. La différence

est que les Hamiltoniens contrôlables équivalents à celui de l'équation (10) de l'article diffèrent dans les deux cas, tout comme les termes de pilotage associés. Le type de problèmes et la manière dont ils sont encodés sur un ordinateur quantique sont également différents. Ici, je décris brièvement comment on traiterait des problèmes bosoniques et de spin- $\frac{1}{2}$ en utilisant la méthode QOCA.

Bosons

Algèbre Les bosons sont décrits par l'algèbre de Lie des opérateurs d'échelle bosonique \hat{b}_i et \hat{b}_i^\dagger qui obéissent aux relations de commutation :

$$[\hat{b}_i^\dagger, \hat{b}_j^\dagger] = \delta_{ij} \quad (3.10)$$

$$[\hat{b}_i^\dagger, \hat{b}_j] = [\hat{b}_i, \hat{b}_j] = 0. \quad (3.11)$$

Hamiltonien contrôlable Un exemple de Hamiltonien contrôlable pour les systèmes bosoniques prend la forme

$$\begin{aligned} \hat{H}_b(t) = & \sum_j (\alpha_j(t) \hat{b}_j + \alpha_j^*(t) \hat{b}_j^\dagger) + \sum_{i,j} \beta_{ij}(t) (\hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j + \hat{b}_j^\dagger \hat{b}_i) + \\ & \sum_{i,j} \gamma_{ij}(t) \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j^\dagger \hat{b}_i \hat{b}_j + \sum_{i,j} \delta_{ij}(t) (\hat{b}_i \hat{b}_j + \hat{b}_j^\dagger \hat{b}_i^\dagger), \end{aligned} \quad (3.12)$$

où les α , β , γ et δ sont des paramètres libres réels. Notez que, contrairement au cas des fermions, chaque terme de (3.12) décrit des processus physiques. Cet Hamiltonien, et l'algèbre de Lie correspondante générée par $\{-i\hat{H}_b\}$, peuvent être échantillonnés pour construire les termes de pilotage $\{\hat{H}_k\}$ de la forme variationnelle QOCA appliquée aux problèmes bosoniques.

Exemple de problème Pour faire un lien étroit avec la discussion sur les fermions, je considère le modèle de Bose-Hubbard (BHM) comme un exemple de problème bosonique

$$\hat{H}_{\text{BHM}} = -t \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j + \frac{U}{2} \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) + \mu \sum_i \hat{n}_i. \quad (3.13)$$

Cet Hamiltonien décrit des bosons en interaction sur un réseau. $\hat{n}_i = \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i$ est l'opérateur nombre di site i , t est l'amplitude de saut, U est la force d'interaction et μ est le potentiel chimique.

Encodage Il existe plusieurs façons d’encoder des modes bosoniques dans des qubits. Ceux-ci requièrent des ressources variables en termes de nombre de qubits et admettent différentes opérations autorisées. La référence [157] détaille différentes stratégies et compare les coûts et implications de chacune en fonction de différents problèmes bosoniques.

Par exemple, on pourrait utiliser l’encodage “Single-Excitation-Subspace” dans lequel on utilise n_{\max} qubits pour coder les n_{\max} premiers niveaux d’énergie d’un mode bosonique. Une telle troncature est nécessaire, car la dimension de l’espace de Hilbert associée aux modes bosoniques est infinie. On écrit l’état contenant n excitations comme

$$|n\rangle \mapsto |0_0 \dots 0_{n-1} 1_n 0_{n+1} \dots 0_{n_{\max}}\rangle, \quad (3.14)$$

et les opérateurs d’échelle associés

$$\hat{b}_k \mapsto \sum_{n=0}^{n_{\max}-1} \sqrt{n+1} \hat{\sigma}_+^n \hat{\sigma}_-^{n+1}, \quad (3.15)$$

$$\hat{b}_k^\dagger \mapsto \sum_{n=0}^{n_{\max}-1} \sqrt{n} \hat{\sigma}_-^{n+1} \hat{\sigma}_+^n, \quad (3.16)$$

sont données par des interactions d’échange au premier voisin.

QOCA et les termes de pilotage Comme pour le modèle de Fermi-Hubbard, l’Ansatz pourrait prendre la forme de l’équation (9) de l’article où $\hat{H}_{\text{prob.}}$ est maintenant le modèle de Bose-Hubbard (3.13). Comme il n’y a pas de termes linéaires en opérateurs bosoniques dans l’équation (3.13), des Hamiltoniens de pilotage potentiels sont de la forme $\alpha(t)\hat{b} + \alpha^*(t)\hat{b}^\dagger$, comme c’était le cas pour le modèle de Fermi-Hubbard. D’autres termes de pilotage bosoniques possibles sont présentés au tableau 3.2. Tous ces termes sont des éléments de l’algèbre de Lie générée par le Hamiltonien de l’équation (3.12).

Spin- $\frac{1}{2}$

Algèbre Les spin- $\frac{1}{2}$ sont décrits par l’algèbre de Lie des matrices de Pauli $\hat{\sigma}_x$, $\hat{\sigma}_y$ et $\hat{\sigma}_z$ qui satisfont les relations de commutation et d’anti-commutation :

$$[\sigma_a, \sigma_b] = 2i\varepsilon_{abc}\sigma_c, \quad (3.17)$$

$$\{\sigma_a, \sigma_b\} = 2\delta_{ab}I, \quad (3.18)$$

où $a, b, c \in x, y, z$ et ε_{abc} est le symbole de Levi-Civita.

Hamiltonien contrôlable Un célèbre théorème de l’informatique quantique [158, 159] affirme que le contrôle générique d’un seul qubit et n’importe quelle interaction entre deux qubits est suffisant pour générer toute matrice unitaire. Un Hamiltonien contrôlable pour les systèmes de qubits est donc de la forme

$$\hat{H}_q(t) = \sum_j (\alpha_{x_j}(t)\hat{\sigma}_x^j + \alpha_{y_j}(t)\hat{\sigma}_y^j) + \sum_{i,j} \beta_{ij}(t)\hat{\sigma}_z^i\hat{\sigma}_z^j, \quad (3.19)$$

où σ_a^i indique l’opérateur σ_a appliqué sur le qubit i . Encore une fois, cet Hamiltonien et son algèbre de Lie correspondante, peuvent être échantillonnés pour constituer les termes de brisure de symétrie $\{\hat{H}_k\}$ de QOCA.

Exemple de problème Un exemple de problème de spin- $\frac{1}{2}$ serait la chaîne XYZ de Heisenberg avec des conditions limites périodiques définies comme

$$\hat{H}_{XYZ} = -\frac{1}{2} \sum_{j=1}^N (J_x \hat{\sigma}_x^j \hat{\sigma}_x^{j+1} + J_y \hat{\sigma}_y^j \hat{\sigma}_y^{j+1} + J_z \hat{\sigma}_z^j \hat{\sigma}_z^{j+1} + h \hat{\sigma}_z^j), \quad (3.20)$$

où l’on associe les indices $N+1 = 1$. Les J_a sont des constantes de couplage et h est l’énergie de chaque spin identique.

Encodage Contrairement aux fermions et aux bosons, les problèmes de spin- $\frac{1}{2}$ sont trivialement encodés en qubits. En effet, ils partagent la même algèbre de Lie $su(2)$.

QOCA et les termes de pilotage Là encore, comme pour les deux derniers exemples, l’Ansatz pourrait prendre la forme habituelle de QOCA où $\hat{H}_{\text{prob.}}$ est maintenant le Hamiltonien (3.20). Les termes brisant la symétrie pourraient être de la forme $\xi_{ab}(t)\hat{\sigma}_a\hat{\sigma}_b$ avec $a \neq b$, puisque ces termes ne commutent pas avec \hat{H}_{XYZ} , ou un pilotage générique sur un site unique de la forme $\alpha_{x_j}(t)\hat{\sigma}_x^j + \alpha_{y_j}(t)\hat{\sigma}_y^j$.

Autres systèmes

Les deux dernières sections illustrent la manière dont on pourrait aborder des problèmes de mécanique quantique de nature différente en utilisant la méthode QOCA. Cependant, il est possible d’appliquer la même technique à une classe plus large de problèmes, qui comprendrait les Hamiltoniens classiques. Les principales étapes de la construction de la forme variationnelle QOCA peuvent être résumées de la manière suivante :

1. **Formuler le problème** en terme d'un Hamiltonien $\hat{H}_{\text{prob.}}$ dont l'état fondamental et sa valeur propre associée constituent la solution du problème.
2. **Encoder** $\hat{H}_{\text{prob.}}$ dans un Hamiltonien de qubits. Notez que le choix de l'encodage peut dépendre du problème.
3. **Trouver un Hamiltonien contrôlable** de la même nature que $\hat{H}_{\text{prob.}}$ *i.e.* bosonique, fermionique, classique, etc.
4. **Sélectionner les termes de pilotage** $\{\hat{H}_k\}$ qui ne commutent pas avec $\hat{H}_{\text{prob.}}$ à partir du Hamiltonien contrôlable.
5. **Construire QOCA** à partir de $\hat{H}_{\text{prob.}}$ et des termes de pilotage sélectionnés.

Conclusion

Dans ce mémoire, j’ai présenté mes travaux de maîtrise portant sur le *Quantum-Optimal-Control-inspired Ansatz*, une nouvelle approche à la forme variationnelle des algorithmes variationnels quantiques. J’ai commencé par introduire cette classe d’algorithmes hybrides classique-quantiques en insistant sur leur modularité et flexibilité les rendant applicables à une vaste gamme de problèmes. J’ai également passé en revue différentes approches à la construction des formes variationnelles en exposant leurs avantages et inconvénients. Ensuite, j’ai proposé comment les méthodes basées sur le Hamiltonien du problème pourraient bénéficier d’idées inspirées par le contrôle optimal de systèmes quantiques. En pratique, ceci revient à ajouter au Hamiltonien un ensemble de termes de pilotage qui ne commutent pas avec ce dernier et donc brisent les symétries du problème. Une fonction d’onde variationnelle est construite en paramétrant le circuit quantique implémentant l’évolution temporelle trottérisée sous le Hamiltonien piloté. J’ai nommé cette nouvelle approche QOCA.

Au chapitre 3, j’ai présenté des résultats de QOCA lorsqu’appliqué au problème de l’état fondamental du modèle de Fermi-Hubbard en les comparant à ceux obtenus par des approches standards. Mes résultats ont d’abord exposé les faiblesses des formes variationnelles conservant les symétries du problème en démontrant que leur performance est extrêmement sensible aux conditions initiales de l’algorithme. Par la suite, j’ai montré que QOCA peut systématiquement produire une meilleure convergence que les autres méthodes, et ce pour différentes tailles de systèmes et états initiaux. Des données indiquant que cet avantage est dû aux termes brisant les symétries ont également été présentées. Dans le but d’étendre l’applicabilité de QOCA, je l’ai utilisé pour préparer l’état fondamental de la molécule d’eau avec plus de précision, et en utilisant des circuits plus courts, que la forme variationnelle UCCSD, une approche bien établie en chimie quantique. Ces derniers résultats indiquent que QOCA a du potentiel au-delà des matériaux quantiques et pourrait même s’appliquer à des problèmes de nature non-fermionique.

Afin d’améliorer davantage la performance de QOCA, à la section 3.4 j’ai élaboré des ave-

nues de recherche que je considère intéressantes. Premièrement, il serait pertinent d'étudier l'effet de termes de pilotage alternatifs à ceux figurant dans l'article de la section 3.2. Ceci pourrait notamment faciliter la création d'un ordre particulier dans l'état variationnel, lui permettant d'exposer, par exemple, des phases anti-ferromagnétiques ou supraconductrices de la matière. J'ai également proposé d'opter pour des stratégies avancées d'optimisation des paramètres variationnels de la FOV dans le but d'augmenter la convergence et de réduire le nombre de paramètres optimisés simultanément.

Tout au long de mon projet, j'ai négligé un aspect excessivement important de la simulation sur des processeurs quantiques à court-terme : les effets néfastes du bruit. Ce choix a été fait, car il était clair que QOCA produirait des circuits quantiques trop coûteux pour être exécutés expérimentalement aujourd'hui. Cependant, les impacts du bruit ne peuvent pas être passés sous silence, et il serait donc intéressant de voir comment QOCA réagit face aux erreurs. Intuitivement, on s'attend à ce que QOCA tolère davantage les erreurs brisant les symétries que les approches basées uniquement sur le Hamiltonien. En effet, ses termes de pilotage pourraient contribuer à retourner l'état variationnel dans le bon secteur de symétries si une erreur, comme une perte de photon, lui en a fait sortir. Toutefois, beaucoup de questions demeurent quant à l'étude des effets du bruit. Par exemple, quelle interaction à deux qubits native est la plus avantageuse pour compiler les circuits de QOCA ? Est-ce que cette porte est réalisable expérimentalement et est-elle robuste au bruit ? Comment est-ce que les performances varient en fonction de la force et du type de bruit ? Quelle méthode de mitigation des erreurs est la mieux adaptée à QOCA ? Quelle est la contribution des termes de pilotage dans la suppression variationnelle de erreurs ? Et finalement, est-ce que l'ajout de termes de dissipation artificielle peut aider davantage la convergence ? Ces questions et les promesses d'applicabilité de QOCA permettront d'approfondir l'étude d'une nouvelle classe de formes variationnelles brisant les symétries du problème.

Annexe A

Exemple de l'encodage de Jordan-Wigner : anneau de Fermi-Hubbard

À titre d'exemple de l'encodage de Jordan-Wigner introduit à la section 2.2.3, je m'intéresserai au modèle de Fermi-Hubbard en une dimension avec conditions limites périodiques, formant ainsi un anneau de L sites. Dans ce cas, le site L est connecté au site 1. En termes d'opérateurs fermioniques, le Hamiltonien de Fermi-Hubbard (2.7) avec cette topologie s'écrit

$$\begin{aligned}\hat{H}_{\text{FHM-1D}} &= \hat{T} + \hat{V}, \\ \hat{T} &= -t \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \left[\sum_{i=1}^{L-1} \left(\hat{a}_{i,\sigma}^\dagger \hat{a}_{i+1,\sigma} + \hat{a}_{i+1,\sigma}^\dagger \hat{a}_{i,\sigma} \right) + \hat{a}_{1,\sigma}^\dagger \hat{a}_{L,\sigma} + \hat{a}_{L,\sigma}^\dagger \hat{a}_{1,\sigma} \right] \\ \hat{V} &= U \sum_{i=1}^L \hat{a}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{a}_{i,\uparrow} \hat{a}_{i,\downarrow}^\dagger \hat{a}_{i,\downarrow} - \mu \sum_{i=1}^L \left(\hat{a}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{a}_{i,\uparrow} + \hat{a}_{i,\downarrow}^\dagger \hat{a}_{i,\downarrow} \right).\end{aligned}\tag{A.1}$$

En utilisant la transformation de Jordan-Wigner (2.20) et en ordonnant les $N = 2L$ orbitales fermioniques comme $|f_{1\uparrow} \dots f_{L\uparrow}; f_{1\downarrow} \dots f_{L\downarrow}\rangle = |q_1 \dots q_L; q_{L+1} \dots q_{2L}\rangle$, on trouve le nouvel

Hamiltonien de qubits

$$\begin{aligned}
\hat{H}_q &= \hat{T} + \hat{V}, \\
\hat{T} &= -\frac{t}{2} \sum_{s=0,L} \left[\sum_{i=1}^{L-1} \left(\hat{X}_{i+s} \hat{X}_{i+1+s} + \hat{Y}_{i+s} \hat{Y}_{i+1+s} \right) + \left(\hat{X}_{1+s} \hat{X}_{L+s} + \hat{Y}_{1+s} \hat{Y}_{L+s} \right) \bigotimes_{l=2+s}^{L-1+s} \hat{Z}_l \right], \\
\hat{V} &= \frac{U}{4} \sum_{i=1}^L (\hat{I} - \hat{Z}_i - \hat{Z}_{i+L} + \hat{Z}_i \hat{Z}_{i+L}) - \frac{\mu}{2} \sum_{i=1}^L (2\hat{I} - \hat{Z}_i - \hat{Z}_{i+L}). \tag{A.2}
\end{aligned}$$

Les opérateurs $\{\hat{X}_j, \hat{Y}_j, \hat{Z}_j\}$ correspondent aux opérateurs de Pauli $\{\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z\}$ appliqués au qubit j . Les termes de sauts dans \hat{T} se transforment comme à l'équation (2.21) et donc seulement ceux connectant les sites 1 et L comportent une chaîne de Jordan-Wigner (chaîne de \hat{Z}), puisque les indices de sites ne sont pas adjacents. Le paramètre s dans \hat{T} permet de distinguer entre les registres de qubits correspondant aux spin \uparrow ($s = 0$) et \downarrow ($s = L$). Tous les termes de \hat{V} se transforment simplement comme à l'équation (2.22). Aucun d'entre eux ne comporte de chaînes de Jordan-Wigner.

Dans le cas spécial du demi-remplissage où $\mu = \frac{U}{2}$, l'interaction \hat{V} de cet Hamiltonien se simplifie d'avantage pour trouver, à une constante près,

$$\begin{aligned}
\hat{H}_q^{\text{demi}} &= \hat{T} + \hat{V}, \\
\hat{T} &= -\frac{t}{2} \sum_{s=0,L} \left[\sum_{i=1}^{L-1} \left(\hat{X}_{i+s} \hat{X}_{i+1+s} + \hat{Y}_{i+s} \hat{Y}_{i+1+s} \right) + \left(\hat{X}_{1+s} \hat{X}_{L+s} + \hat{Y}_{1+s} \hat{Y}_{L+s} \right) \bigotimes_{l=2+s}^{L-1+s} \hat{Z}_l \right], \\
\hat{V} &= \frac{U}{4} \sum_{i=1}^L \hat{Z}_i \hat{Z}_{i+L}. \tag{A.3}
\end{aligned}$$

Cet Hamiltonien est présenté schématiquement à la figure A.1.

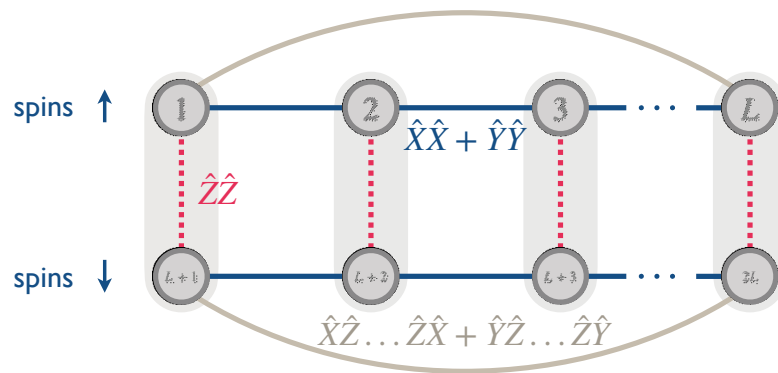


FIGURE A.1 Représentation schématisée d’une chaîne unidimensionnelle de Hubbard avec conditions limites périodiques à demi-remplissage. Chaque site i est encodé à l’aide de deux qubits numérotés i et $i + L$ où L est le nombre de sites. Après la transformation de Jordan-Wigner, les termes de saut de l’équation (A.1) prennent la forme de $\hat{X}\hat{X} + \hat{Y}\hat{Y}$ lorsque les sites sont voisins et $\hat{X}\hat{Z}\dots\hat{Z}\hat{X} + \hat{Y}\hat{Z}\dots\hat{Z}\hat{Y}$ pour le terme reliant les sites 1 et L . Les termes de Coulomb entre les électrons sont données par des interactions $\hat{Z}\hat{Z}$ entre les qubits d’un même site.

Annexe B

L'algorithme QAOA (Quantum-Approximate- Optimization-Algorithm)

Dans la version originale de l'algorithme QAOA [61], la fonction objectif à minimiser est encodée dans un Hamiltonien de phase C diagonal dans la base de calcul qui prend typiquement la forme

$$C = \sum_{j < k} w_{jk} \hat{Z}_j \hat{Z}_k, \quad (\text{B.1})$$

où w_{jk} est un poids scalaire réel et \hat{Z}_j dénote l'opérateur de Pauli \hat{Z} agissant sur le qubit j . Cet Hamiltonien encode généralement un graphe où on retrouve une arête entre les sommets j et k lorsque $w_{jk} \neq 0$.

La forme variationnelle constitue en l'application répétitive de deux unitaires en alternance pour p cycles. Chaque cycle comprend deux paramètres variationnels, γ_j et β_j pour un total de $2p$ paramètres. La première unitaire implémente la fonction objectif et applique une phase relative aux paires de qubits figurant dans la connectivité du problème

$$U_C(\gamma) = e^{-i\gamma C} = \prod_{j < k} e^{-iw_{jk} \hat{Z}_j \hat{Z}_k}. \quad (\text{B.2})$$

La deuxième opération unitaire est un Hamiltonien de mélange¹ permettant de mélanger

1. *Driver Hamiltonian* ou *Mixing Hamiltonian* en anglais.

les états de base à même une superposition

$$U_B(\beta) = e^{-i\beta B} = \prod_j e^{-i\beta \hat{X}_j}; \quad B = \sum_j \hat{X}_j, \quad (\text{B.3})$$

où \hat{X}_j dénote l'opérateur de Pauli $\hat{\sigma}_x$ agissant sur le qubit j . Je note que les auteurs de la référence [85] ont introduit une classe plus générale d'Hamiltonien de mélange et ont ainsi rebaptisé l'acronyme en *Quantum-Alternating-Operator-Ansatz*.

Avec ces unitaires, un QAOA de niveau $p = 1$ s'écrit $U(\gamma, \beta) = U_B(\beta)U_C(\gamma)$ et donc la forme variationnelle de niveau $p > 1$ s'écrit

$$U_{\text{QAOA}}(\gamma, \beta) = \prod_{l=1}^p U_B(\beta_l)U_C(\gamma_l), \quad (\text{B.4})$$

où $\gamma = (\gamma_1, \dots, \gamma_p)$ et $\beta = (\beta_1, \dots, \beta_p)$ regroupent les $2p$ paramètres. Ici, et pour le reste de ce mémoire, j'utilise la convention $\prod_i^N U_i = U_N \cdots U_1$ pour la multiplication d'opérateurs. L'état initial utilisé est typiquement l'état fondamental de $-B$, soit $|+\rangle^{\otimes N}$, où N est le nombre de qubits. La forme variationnelle (B.4) produit l'état paramétré par $\{\gamma, \beta\}$

$$|\gamma, \beta\rangle = U_{\text{QAOA}}(\gamma, \beta)|+\rangle^{\otimes N} \quad (\text{B.5})$$

et la valeur de la fonction objectif dans l'état de base (chaîne binaire) \mathbf{z} est définie comme

$$C(\mathbf{z}) \equiv \langle C \rangle = \langle \gamma, \beta | C | \gamma, \beta \rangle. \quad (\text{B.6})$$

Le but de l'algorithme est de déterminer la chaîne binaire \mathbf{z}^* qui minimise $C(\mathbf{z})$, donc

$$\mathbf{z}^* = \arg \min_{\mathbf{z}} C(\mathbf{z}). \quad (\text{B.7})$$

Il est important de noter que \mathbf{z}^* n'est qu'une approximation de la solution optimale du problème. Cependant, dans de nombreux cas, une bonne solution approximative est satisfaisante.

QAOA a déjà fait l'objet de réalisations expérimentales [160, 161]. Cependant, le taux de décohérence dans les processeurs quantiques demeure trop élevé pour implémenter une FOV suffisamment profonde pour produire des résultats précis pour des graphes arbitraires.

Bibliographie

- [1] Feynman, R. P. *International journal of theoretical physics* **21**(6), 467–488 (1982).
- [2] Shor, P. W. In *Proceedings 35th annual symposium on foundations of computer science*, 124–134. Ieee, (1994).
- [3] Arute, F., Arya, K., Babbush, R., Bacon, D., Bardin, J. C., Barends, R., Biswas, R., Boixo, S., Brandao, F. G., Buell, D. A., et al. *Nature* **574**(7779), 505–510 (2019).
- [4] Preskill, J. *Quantum* **2**, 79 (2018).
- [5] Peruzzo, A., McClean, J., Shadbolt, P., Yung, M.-H., Zhou, X.-Q., Love, P. J., Aspuru-Guzik, A., and O’Brien, J. L. *Nature communications* **5**, 4213 (2014).
- [6] McClean, J. R., Romero, J., Babbush, R., and Aspuru-Guzik, A. *New Journal of Physics* **18**(2), 023023 (2016).
- [7] Hubbard, J. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences* **276**(1365), 238–257 (1963).
- [8] Gutzwiller, M. C. *Physical Review Letters* **10**(5), 159 (1963).
- [9] Kanamori, J. *Progress of Theoretical Physics* **30**(3), 275–289 (1963).
- [10] Hubbard, J. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences* **281**(1386), 401–419 (1964).
- [11] Tasaki, H. *Journal of Physics: Condensed Matter* **10**(20), 4353 (1998).
- [12] Masuda, K. and Yamamoto, D. *Physical Review B* **91**(10), 104508 (2015).
- [13] Guillot, M. *Compétition entre l’antiferromagnétisme et la supraconductivité dans le modèle et Hubbard appliqué aux cuprates*. Université de Sherbrooke., (2007).
- [14] Kaczmarczyk, J., Spalek, J., Schickling, T., and Bünnemann, J. *Physical Review B* **88**(11), 115127 (2013).
- [15] Potthoff, M., Aichhorn, M., and Dahnken, C. *Physical review letters* **91**(20), 206402 (2003).
- [16] Kotliar, G., Savrasov, S. Y., Palsson, G., and Biroli, G. *Physical review letters* **87**(18), 186401 (2001).
- [17] Hettler, M., Tahvildar-Zadeh, A., Jarrell, M., Pruschke, T., and Krishnamurthy, H. *Physical Review B* **58**(12), R7475 (1998).
- [18] Hettler, M., Mukherjee, M., Jarrell, M., and Krishnamurthy, H. *Physical Review B* **61**(19), 12739 (2000).

- [19] Sénéchal, D., Perez, D., and Pioro-Ladriere, M. *Physical review letters* **84**(3), 522 (2000).
- [20] Yamada, S., Imamura, T., and Machida, M. In *SC'05: Proceedings of the 2005 ACM/IEEE Conference on Supercomputing*, 44–44. IEEE, (2005).
- [21] Kitaev, A. Y. *arXiv preprint quant-ph/9511026* (1995).
- [22] Kitaev, A. Y., Shen, A., Vyalyi, M. N., and Vyalyi, M. N. *Classical and quantum computation*. Number 47. American Mathematical Soc., (2002).
- [23] Aharonov, D., Ta-Shma, A., and Ta-Shma, A. In *Proceedings of the thirty-fifth annual ACM symposium on Theory of computing*, 20–29. ACM, (2003).
- [24] Boixo, S., Knill, E., and Somma, R. D. *Quantum Information & Computation* **9**(9), 833–855 (2009).
- [25] Dallaire-Demers, P.-L., Stechly, M., Gonthier, J. F., Bashige, N. T., Romero, J., and Cao, Y. *arXiv preprint arXiv:2003.01862* (2020).
- [26] Balian, R. and Vénéroni, M. Technical report, CEA Centre d’Etudes Nucleaires de Saclay, (1988).
- [27] Dalfovo, F., Giorgini, S., Pitaevskii, L. P., and Stringari, S. *Reviews of Modern Physics* **71**(3), 463 (1999).
- [28] Haegeman, J., Cirac, J. I., Osborne, T. J., Pižorn, I., Verschelde, H., and Verstraete, F. *Physical review letters* **107**(7), 070601 (2011).
- [29] Shi, T., Demler, E., and Cirac, J. I. *Annals of Physics* **390**, 245–302 (2018).
- [30] Vanderstraeten, L., Haegeman, J., and Verstraete, F. *SciPost Phys. Lect. Notes* **7** (2019).
- [31] Di Paolo, A., Baker, T. E., Foley, A., Sénéchal, D., and Blais, A. *arXiv preprint arXiv:1912.01018* (2019).
- [32] Feldmeier, H. and Schnack, J. *Reviews of Modern Physics* **72**(3), 655 (2000).
- [33] Szabo, A. and Ostlund, N. S. *Modern quantum chemistry: introduction to advanced electronic structure theory*. Courier Corporation, (2012).
- [34] Helgaker, T., Jorgensen, P., and Olsen, J. *Molecular electronic-structure theory*. John Wiley & Sons, (2014).
- [35] Verstraete, F., Murg, V., and Cirac, J. I. *Advances in Physics* **57**(2), 143–224 (2008).
- [36] Ashida, Y., Shi, T., Bañuls, M. C., Cirac, J. I., and Demler, E. *Physical Review B* **98**(2), 024103 (2018).
- [37] Baker, T. E., Desrosiers, S., Tremblay, M., and Thompson, M. P. *arXiv preprint arXiv:1911.11566* (2019).
- [38] Lloyd, S. *Science*, 1073–1078 (1996).
- [39] Wiesner, S. *arXiv preprint quant-ph/9603028* (1996).
- [40] Zalka, C. *Fortschritte der Physik: Progress of Physics* **46**(6-8), 877–879 (1998).
- [41] Lidar, D. A. and Wang, H. *Physical Review E* **59**(2), 2429 (1999).
- [42] Ortiz, G., Gubernatis, J. E., Knill, E., and Laflamme, R. *Physical Review A* **64**(2), 022319 (2001).

- [43] Ortiz, G., Gubernatis, J., Knill, E., and Laflamme, R. *Physical Review A* **65**(2), 029902 (2002).
- [44] Aspuru-Guzik, A., Dutoi, A. D., Love, P. J., and Head-Gordon, M. *Science* **309**(5741), 1704–1707 (2005).
- [45] Wang, H., Kais, S., Aspuru-Guzik, A., and Hoffmann, M. R. *Physical Chemistry Chemical Physics* **10**(35), 5388–5393 (2008).
- [46] Wecker, D., Bauer, B., Clark, B. K., Hastings, M. B., and Troyer, M. *Physical Review A* **90**(2), 022305 (2014).
- [47] Hastings, M. B., Wecker, D., Bauer, B., and Troyer, M. *arXiv preprint arXiv:1403.1539* (2014).
- [48] Poulin, D., Hastings, M. B., Wecker, D., Wiebe, N., Doherty, A. C., and Troyer, M. *arXiv preprint arXiv:1406.4920* (2014).
- [49] Babbush, R., McClean, J., Wecker, D., Aspuru-Guzik, A., and Wiebe, N. *Physical Review A* **91**(2), 022311 (2015).
- [50] Kandala, A., Mezzacapo, A., Temme, K., Takita, M., Brink, M., Chow, J. M., and Gambetta, J. M. *Nature* **549**(7671), 242 (2017).
- [51] Nam, Y., Chen, J.-S., Pienti, N. C., Wright, K., Delaney, C., Maslov, D., Brown, K. R., Allen, S., Amini, J. M., Apisdorf, J., et al. *arXiv preprint arXiv:1902.10171* (2019).
- [52] Bonet-Monroig, X., Sagastizabal, R., Singh, M., and O’Brien, T. *Physical Review A* **98**(6), 062339 (2018).
- [53] Sagastizabal, R., Bonet-Monroig, X., Singh, M., Rol, M. A., Bultink, C., Fu, X., Price, C., Ostroukh, V., Muthusubramanian, N., Bruno, A., et al. *Physical Review A* **100**(1), 010302 (2019).
- [54] Temme, K., Bravyi, S., and Gambetta, J. M. *Physical review letters* **119**(18), 180509 (2017).
- [55] Endo, S., Benjamin, S. C., and Li, Y. *Physical Review X* **8**(3), 031027 (2018).
- [56] Kandala, A., Temme, K., Corcoles, A. D., Mezzacapo, A., Chow, J. M., and Gambetta, J. M. *arXiv preprint arXiv:1805.04492* (2018).
- [57] Zoufal, C., Lucchi, A., and Woerner, S. *arXiv preprint arXiv:1904.00043* (2019).
- [58] Bravo-Prieto, C., LaRose, R., Cerezo, M., Subasi, Y., Cincio, L., and Coles, P. J. *arXiv preprint arXiv:1909.05820* (2019).
- [59] Schuld, M. and Killoran, N. *Physical review letters* **122**(4), 040504 (2019).
- [60] Havlíček, V., Córcoles, A. D., Temme, K., Harrow, A. W., Kandala, A., Chow, J. M., and Gambetta, J. M. *Nature* **567**(7747), 209 (2019).
- [61] Farhi, E., Goldstone, J., and Gutmann, S. *arXiv preprint arXiv:1411.4028* (2014).
- [62] Reiher, M., Wiebe, N., Svore, K. M., Wecker, D., and Troyer, M. *Proceedings of the National Academy of Sciences* **114**(29), 7555–7560 (2017).
- [63] Wecker, D., Hastings, M. B., Wiebe, N., Clark, B. K., Nayak, C., and Troyer, M. *Physical Review A* **92**(6), 062318 (2015).

- [64] Olson, J., Cao, Y., Romero, J., Johnson, P., Dallaire-Demers, P.-L., Sawaya, N., Narang, P., Kivlichan, I., Wasielewski, M., and Aspuru-Guzik, A. *arXiv preprint arXiv:1706.05413* (2017).
- [65] Cao, Y., Romero, J., Olson, J. P., Degroote, M., Johnson, P. D., Kieferová, M., Kivlichan, I. D., Menke, T., Peropadre, B., Sawaya, N. P., et al. *Chemical reviews* **119**(19), 10856–10915 (2019).
- [66] Robert, A., Barkoutsos, P. K., Woerner, S., and Tavernelli, I. *arXiv preprint arXiv:1908.02163* (2019).
- [67] Di Paolo, A., Barkoutsos, P. K., Tavernelli, I., and Blais, A. *arXiv preprint arXiv:1909.08640* (2019).
- [68] McClean, J. R., Kimchi-Schwartz, M. E., Carter, J., and de Jong, W. A. *Physical Review A* **95**(4), 042308 (2017).
- [69] Ollitrault, P. J., Kandala, A., Chen, C.-F., Barkoutsos, P. K., Mezzacapo, A., Pistoia, M., Sheldon, S., Woerner, S., Gambetta, J., and Tavernelli, I. *arXiv preprint arXiv:1910.12890* (2019).
- [70] Jones, T., Endo, S., McArdle, S., Yuan, X., and Benjamin, S. C. *Physical Review A* **99**(6), 062304 (2019).
- [71] Higgott, O., Wang, D., and Brierley, S. *Quantum* **3**, 156 (2019).
- [72] Nakanishi, K. M., Mitarai, K., and Fujii, K. *Physical Review Research* **1**(3), 033062 (2019).
- [73] Parrish, R. M., Hohenstein, E. G., McMahon, P. L., and Martínez, T. J. *Physical review letters* **122**(23), 230401 (2019).
- [74] Li, Y. and Benjamin, S. C. *Physical Review X* **7**(2), 021050 (2017).
- [75] Endo, S., Li, Y., Benjamin, S., and Yuan, X. *arXiv preprint arXiv:1812.08778* (2018).
- [76] Smith, A., Kim, M., Pollmann, F., and Knolle, J. *npj Quantum Information* **5**(1), 1–13 (2019).
- [77] McArdle, S., Jones, T., Endo, S., Li, Y., Benjamin, S., and Yuan, X. *arXiv preprint arXiv:1804.03023* (2018).
- [78] Beach, M. J., Melko, R. G., Grover, T., and Hsieh, T. H. *Physical Review B* **100**(9), 094434 (2019).
- [79] McArdle, S., Endo, S., Aspuru-Guzik, A., Benjamin, S. C., and Yuan, X. *Reviews of Modern Physics* **92**(1), 015003 (2020).
- [80] Jordan, P. and Wigner, E. P. In *The Collected Works of Eugene Paul Wigner*, 109–129. Springer (1993).
- [81] Whitfield, J. D., Biamonte, J., and Aspuru-Guzik, A. *Molecular Physics* **109**(5), 735–750 (2011).
- [82] Farhi, E. and Harrow, A. W. *arXiv preprint arXiv:1602.07674* (2016).
- [83] Yang, Z.-C., Rahmani, A., Shabani, A., Neven, H., and Chamon, C. *Physical Review X* **7**(2), 021027 (2017).
- [84] Wang, Z., Hadfield, S., Jiang, Z., and Rieffel, E. G. *Physical Review A* **97**(2), 022304 (2018).

- [85] Hadfield, S., Wang, Z., O’Gorman, B., Rieffel, E. G., Venturelli, D., and Biswas, R. *Algorithms* **12**(2), 34 (2019).
- [86] Farhi, E., Goldstone, J., Gutmann, S., and Sipser, M. *arXiv preprint quant-ph/0001106* (2000).
- [87] Barkoutsos, P. K., Gonthier, J. F., Sokolov, I., Moll, N., Salis, G., Fuhrer, A., Ganzhorn, M., Egger, D. J., Troyer, M., Mezzacapo, A., et al. *Physical Review A* **98**(2), 022322 (2018).
- [88] Hoffmann, M. R. and Simons, J. *The Journal of chemical physics* **88**(2), 993–1002 (1988).
- [89] Bartlett, R. J., Kucharski, S. A., and Noga, J. *Chemical physics letters* **155**(1), 133–140 (1989).
- [90] Wecker, D., Hastings, M. B., and Troyer, M. *Physical Review A* **92**(4), 042303 (2015).
- [91] Babbush, R., Wiebe, N., McClean, J., McClain, J., Neven, H., and Chan, G. K.-L. *Physical Review X* **8**(1), 011044 (2018).
- [92] Kivlichan, I. D., McClean, J., Wiebe, N., Gidney, C., Aspuru-Guzik, A., Chan, G. K.-L., and Babbush, R. *Physical review letters* **120**(11), 110501 (2018).
- [93] Dallaire-Demers, P.-L., Romero, J., Veis, L., Sim, S., and Aspuru-Guzik, A. *Quantum Science and Technology* **4**(4), 045005 (2019).
- [94] McClean, J. R., Boixo, S., Smelyanskiy, V. N., Babbush, R., and Neven, H. *Nature communications* **9**(1), 4812 (2018).
- [95] Sim, S., Johnson, P. D., and Aspuru-Guzik, A. *Advanced Quantum Technologies* **2**(12), 1900070 (2019).
- [96] Ganzhorn, M., Egger, D. J., Barkoutsos, P., Ollitrault, P., Salis, G., Moll, N., Roth, M., Fuhrer, A., Mueller, P., Woerner, S., et al. *Physical Review Applied* **11**(4), 044092 (2019).
- [97] Hatano, N. and Suzuki, M. In *Quantum annealing and other optimization methods*, 37–68. Springer (2005).
- [98] De Raedt, H. and De Raedt, B. *Physical Review A* **28**(6), 3575 (1983).
- [99] Janke, W. and Sauer, T. *Physics Letters A* **165**(3), 199–205 (1992).
- [100] Abrams, D. S. and Lloyd, S. *Physical Review Letters* **79**(13), 2586 (1997).
- [101] Abrams, D. S. and Lloyd, S. *Physical Review Letters* **83**(24), 5162 (1999).
- [102] Nielsen, M. A. and Chuang, I. (2002).
- [103] Rubin, N. C., Babbush, R., and McClean, J. *New Journal of Physics* **20**(5), 053020 (2018).
- [104] Izmaylov, A. F., Yen, T.-C., and Ryabinkin, I. G. *Chemical science* **10**(13), 3746–3755 (2019).
- [105] Verteletskyi, V., Yen, T.-C., and Izmaylov, A. F. *The Journal of Chemical Physics* **152**(12), 124114 (2020).
- [106] Crawford, O., van Straaten, B., Wang, D., Parks, T., Campbell, E., and Brierley, S. *arXiv preprint arXiv:1908.06942* (2019).
- [107] Gokhale, P., Angiuli, O., Ding, Y., Gui, K., Tomesh, T., Suchara, M., Martonosi, M., and Chong, F. T. *arXiv preprint arXiv:1907.13623* (2019).

- [108] Gokhale, P. and Chong, F. T. *arXiv preprint arXiv:1908.11857* (2019).
- [109] Jena, A., Genin, S., and Mosca, M. *arXiv preprint arXiv:1907.07859* (2019).
- [110] Yen, T.-C., Verteletskyi, V., and Izmaylov, A. F. *Journal of Chemical Theory and Computation* **16**(4), 2400–2409 (2020).
- [111] Zhao, A., Tranter, A., Kirby, W. M., Ung, S. F., Miyake, A., and Love, P. *arXiv preprint arXiv:1908.08067* (2019).
- [112] Bonet-Monroig, X., Babbush, R., and O’Brien, T. E. *arXiv preprint arXiv:1908.05628* (2019).
- [113] Raeisi, S., Wiebe, N., and Sanders, B. C. *New Journal of Physics* **14**(10), 103017 (2012).
- [114] Romero, J., Babbush, R., McClean, J. R., Hempel, C., Love, P. J., and Aspuru-Guzik, A. *Quantum Science and Technology* **4**(1), 014008 (2018).
- [115] Guerreschi, G. G. and Smelyanskiy, M. *arXiv preprint arXiv:1701.01450* (2017).
- [116] Mitarai, K. and Fujii, K. *Physical Review Research* **1**(1), 013006 (2019).
- [117] Mitarai, K., Negoro, M., Kitagawa, M., and Fujii, K. *Physical Review A* **98**(3), 032309 (2018).
- [118] Kolda, T. G., Lewis, R. M., and Torczon, V. *SIAM review* **45**(3), 385–482 (2003).
- [119] Nelder, J. A. and Mead, R. *The computer journal* **7**(4), 308–313 (1965).
- [120] Byrd, R. H., Lu, P., Nocedal, J., and Zhu, C. *SIAM Journal on scientific computing* **16**(5), 1190–1208 (1995).
- [121] Spall, J. C. et al. *IEEE transactions on automatic control* **37**(3), 332–341 (1992).
- [122] Spall, J. C. *Automatica* **33**(1), 109–112 (1997).
- [123] Spall, J. C. *IEEE transactions on automatic control* **45**(10), 1839–1853 (2000).
- [124] Verdon, G., Broughton, M., McClean, J. R., Sung, K. J., Babbush, R., Jiang, Z., Neven, H., and Mohseni, M. *arXiv preprint arXiv:1907.05415* (2019).
- [125] Wilson, M., Stromswold, S., Wudarski, F., Hadfield, S., Tubman, N. M., and Rieffel, E. *arXiv preprint arXiv:1908.03185* (2019).
- [126] Powell, M. J. In *Advances in optimization and numerical analysis*, 51–67. Springer (1994).
- [127] Powell, M. J. *Acta numerica* **7**, 287–336 (1998).
- [128] Powell, M. J. *Mathematics Today-Bulletin of the Institute of Mathematics and its Applications* **43**(5), 170–174 (2007).
- [129] Dantzig, G. B. *Linear programming and extensions*, volume 48. Princeton university press, (1998).
- [130] Powell, M. J. *Mathematical programming* **97**(3), 605–623 (2003).
- [131] Werschnik, J. and Gross, E. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* **40**(18), R175 (2007).
- [132] Rice, S. A. *Nature* **409**(6818), 422–426 (2001).
- [133] Shapiro, M. and Brumer, P. *Physics Reports* **425**(4), 195–264 (2006).
- [134] Khaneja, N., Reiss, T., Luy, B., and Glaser, S. J. *Journal of Magnetic Resonance* **162**(2), 311–319 (2003).

- [135] Khaneja, N., Reiss, T., Kehlet, C., Schulte-Herbrüggen, T., and Glaser, S. J. *Journal of magnetic resonance* **172**(2), 296–305 (2005).
- [136] Motzoi, F., Gambetta, J. M., Merkel, S., and Wilhelm, F. *Physical Review A* **84**(2), 022307 (2011).
- [137] d'Alessandro, D. *Introduction to quantum control and dynamics*. CRC press, (2007).
- [138] Pinch, E. R. *Optimal control and the calculus of variations*. Oxford University Press, (1995).
- [139] Lewis, F. L. and Syrmos, V. L. *New York* (1995).
- [140] Lee, E. and Marcus, L. Inc., *New York London Sydney* (1967).
- [141] Fleming, W., Rishel, R., Marchuk, G., Balakrishnan, A., Borovkov, A., Makarov, V., Rubinov, A., Liptser, R., Shiryayev, A., Krassovsky, N., et al. *Deterministic and Stochastic Optimal Control* (1975).
- [142] Lloyd, S. *arXiv preprint arXiv:1812.11075* (2018).
- [143] Biamonte, J. *arXiv preprint arXiv:1903.04500* (2019).
- [144] Reiner, J.-M., Wilhelm-Mauch, F., Schön, G., and Marthaler, M. *Quantum Science and Technology* **4**(3), 035005 (2019).
- [145] Cade, C., Mineh, L., Montanaro, A., and Stanisic, S. *arXiv preprint arXiv:1912.06007* (2019).
- [146] Xu, L., Lee, J. T., and Freericks, J. *arXiv preprint arXiv:2001.06957* (2020).
- [147] Taube, A. G. and Bartlett, R. J. *International journal of quantum chemistry* **106**(15), 3393–3401 (2006).
- [148] Sokolov, I. O., Barkoutsos, P. K., Ollitrault, P. J., Greenberg, D., Rice, J., Pistoia, M., and Tavernelli, I. *The Journal of Chemical Physics* **152**(12), 124107 (2020).
- [149] Montanaro, A. and Stanisic, S. *arXiv preprint arXiv:2006.01179* (2020).
- [150] Gard, B. T., Zhu, L., Barron, G. S., Mayhall, N. J., Economou, S. E., and Barnes, E. *npj Quantum Information* **6**(1), 1–9 (2020).
- [151] Sagastizabal, R., Bonet-Monroig, X., Singh, M., Rol, M., Bultink, C., Fu, X., Price, C., Ostroukh, V., Muthusubramanian, N., Bruno, A., et al. *arXiv preprint arXiv:1902.11258* (2019).
- [152] Jiang, Z., Sung, K. J., Kechedzhi, K., Smelyanskiy, V. N., and Boixo, S. *Physical Review Applied* **9**(4), 044036 (2018).
- [153] Foxen, B., Neill, C., Dunsworth, A., Roushan, P., Chiaro, B., Megrant, A., Kelly, J., Chen, Z., Satzinger, K., Barends, R., et al. *arXiv preprint arXiv:2001.08343* (2020).
- [154] Verstraete, F., Cirac, J. I., and Latorre, J. I. *Physical Review A* **79**(3), 032316 (2009).
- [155] Ferris, A. J. *Physical review letters* **113**(1), 010401 (2014).
- [156] Coulthard, J., Clark, S. R., Al-Assam, S., Cavalleri, A., and Jaksch, D. *Physical Review B* **96**(8), 085104 (2017).
- [157] Sawaya, N. P., Menke, T., Kyaw, T. H., Johri, S., Aspuru-Guzik, A., and Guerreschi, G. G. *arXiv preprint arXiv:1909.12847* (2019).

- [158] Barenco, A., Bennett, C. H., Cleve, R., DiVincenzo, D. P., Margolus, N., Shor, P., Sleator, T., Smolin, J. A., and Weinfurter, H. *Physical review A* **52**(5), 3457 (1995).
- [159] DiVincenzo, D. P. *Physical Review A* **51**(2), 1015 (1995).
- [160] Arute, F., Arya, K., Babbush, R., Bacon, D., Bardin, J. C., Barends, R., Boixo, S., Broughton, M., Buckley, B. B., Buell, D. A., et al. *arXiv preprint arXiv:2004.04197* (2020).
- [161] Lacroix, N., Hellings, C., Andersen, C. K., Di Paolo, A., Remm, A., Lazar, S., Krinner, S., Norris, G. J., Gabureac, M., Blais, A., et al. *arXiv preprint arXiv:2005.05275* (2020).